

Magneettivuon lukkiutumisen teoria ja simulointi  
korkean lämpötilan YBCO suprajohteeseen  
dooppattujen kolumnaaristen  
lukkiutumiskeskusten koon ja konsentraation  
vaikutusten selvittämiseksi

Pro gradu -tutkielma  
Turun yliopisto  
Fysiikan ja tähtitieteen laitos  
Fysiikka  
Lokakuu 2018  
LuK Elmeri Rivasto  
Tarkastajat:  
Prof. Petriina Paturi  
FT Hannu Huhtinen

Turun yliopiston laatujärjestelmän mukaisesti tämän julkaisun alkuperäisyys on tarkastettu Turnitin OriginalityCheck-järjestelmällä

**RIVASTO, ELMERI:** Magneettivuon lukkiutumisen teoria ja simulointi korkean lämpötilan YBCO suprajohteeseen dooppattujen kolumnaaristen lukkiutumiskeskusten koon ja konsentraation vaikutusten selvittämiseksi

Pro gradu -tutkielma, 66 s., 31 liites.  
Fysiikka  
Lokakuu 2018

---

Suprajohteet ovat olleet vuosikymmeniä intensiivisen tutkimuksen kohteena niitä hyödyntävien sovelluskohteiden laajasta määrästä johtuen. Erityisen mielenkiinnon kohteena ovat myöhemmin löydetty korkean lämpötilan keraamiset suprajohteet, joiden poikkeuksellisen korkea transitiolämpötila helpottaa suprajohteita hyödyntävien sovellusten kaupallistamista. Useista tunnetuista korkean lämpötilan suprajohteista tässä tutkielmassa käsiteltävä  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$  (YBCO) on osoittautunut käytännön sovellusten kannalta lupaavimmaksi vaihtoehdoksi. Useat mahdolliset sovelluskohteet hyödyntävät korkeissa ulkoisissa magneettikentissä toimivia tyypin II suprajohteiden ohutkalvorakenteita, joiden läpi ulkoinen magneettikenttä pääsee tunkeutumaan pylväsmäisten vorteksin muodossa. Ohutkalvoon johdettava virta saa vorteksit liikkumaan johtaen tehohäviöihin. Vorteksin haitallista liikettä voidaan rajoittaa dooppaamalla suprajohtavaa materiaalia ei-suprajohtavilla lukkiutumiskeskusilla ja täten parantaa suprajohtavan materiaalin läpäisevää suurinta mahdollista virtaa.

Tässä tutkielmassa perehdyttiin suprajohteiden fenomenologiseen Ginzburg-Landau-teoriaan, jonka ennustamia tuloksia käytettiin vorteksin lukkiutumisen dynamiikan mallintamiseen kolumnaarisisissa lukkiutumiskeskusissa. Aikaisemmin suoritettut kokeelliset kriittisen virrantiheyden kulmariippuvuusmittaukset 2%, 4% ja 6%-konsentraatioilla  $\text{BaHfO}_3$  (BHO),  $\text{BaZrO}_3$  (BZO) ja  $\text{BaSnO}_3$  (BSO)-doopatuille YBCO-ohutkalvoille mahdollistivat kokeellisten tulosten vertaamisen idealisoidun simulaation tuottamaan dataan. Halkaisijoiltaan 4 nm ja 10 nm olevien BHO- ja BZO-kolumnien johdosta voitiin tehdä päätelmiä erityisesti kolumnien konsentraation ja koon vaikutuksesta vorteksin lukkiutumisen dynamiikkaan. Simulaatioiden avulla tehtiin myös päätelmiä kolumnien orientaatiosta YBCO:n  $c$ -akseliin nähden sekä muista YBCO:n hilassa mahdollisesti esiintyvistä vortekseista lukitsevista kidevirheistä.

Asiasanat: Suprajohtavuus, Ginzburg-Landau-teoria, vorteksi, vuon lukkiutuminen, molekyyliidynamiikkasimulaatio, YBCO

# Sisältö

<b>Johdanto</b>	<b>1</b>
<b>1 Suprajohtavuus</b>	<b>3</b>
1.1 Yleiset ominaisuudet . . . . .	3
1.2 Tyypin II suprajohteet . . . . .	4
1.3 Ginzburg-Landau-teoria . . . . .	5
1.4 Tyypin II suprajohde ulkoisessa magneettikentässä . . . . .	6
1.4.1 Meissnerin tila ja tunkeutumissyvyys . . . . .	6
1.4.2 Vorteksit . . . . .	7
1.4.3 Sekatila . . . . .	10
1.4.4 Faasidiagrammi . . . . .	11
1.5 Vorteksiin kohdistuvat voimat . . . . .	13
1.5.1 Jännitysvoima . . . . .	13
1.5.2 Vorteksien välinen voima . . . . .	15
1.5.3 Kitkavoima . . . . .	16
1.5.4 Ulkoisen kentän aiheuttama voima . . . . .	18
1.5.5 Lukkiutumiskoito . . . . .	18
1.6 Vorteksien lukkiutuminen . . . . .	20
1.6.1 Tehohäviöt . . . . .	21
1.6.2 Kriittinen virrantiheys ja vuon viruminen . . . . .	22
1.6.3 Lukkiutuneiden vorteksien välinen vuorovaikutus . . . . .	24
1.6.4 Vorteksien lukkiutumisen statistiikkaa . . . . .	26
<b>2 YBCO</b>	<b>29</b>
2.1 Rakenne . . . . .	30
2.2 Vuon lukkiutuminen . . . . .	31
2.2.1 Luontaiset lukkiutumiskeskukset . . . . .	32

2.2.2	Keinotekoiset lukkiutumiskeskukset . . . . .	34
<b>3</b>	<b>Simulaatiomalli</b>	<b>36</b>
3.1	Molekyyliidynamiikkasimulaatio . . . . .	36
3.2	Käytetyn simulaatiomallin yksityiskohdat . . . . .	37
<b>4</b>	<b>Tulokset</b>	<b>40</b>
4.1	Lukkiutumisvoima-analyysi . . . . .	41
4.2	Kriittisen virrantiheyden kulmariippuvuus . . . . .	46
4.3	Simulaatiotulokset . . . . .	49
4.3.1	Kvantitatiivinen tarkastelu . . . . .	51
4.3.2	Kvalitatiivinen analyysi . . . . .	56
4.4	Simulaatioiden ja kokeellisten tulosten vastaavuus . . . . .	59
<b>5</b>	<b>Johtopäätökset</b>	<b>62</b>
	<b>Viitteet</b>	<b>64</b>
<b>A</b>	<b>Ginzburg-Landau-yhtälöt</b>	<b>A-1</b>
A.1	Vaiheparametrin yksikäsitteisyyslause . . . . .	A-2
A.2	Parametrien $a$ ja $b$ lämpötilariippuvuus . . . . .	A-3
<b>B</b>	<b>Tunkeutumisvyvyys</b>	<b>B-4</b>
<b>C</b>	<b>Koherenssipituus</b>	<b>C-5</b>
<b>D</b>	<b>Londonin yhtälö magneettikentälle</b>	<b>D-7</b>
<b>E</b>	<b>Vorteksit</b>	<b>E-9</b>
E.1	Vorteksit anisotropisessa materiaalissa . . . . .	E-11
<b>F</b>	<b>Pyörteisyysvektori</b>	<b>F-14</b>

<b>G</b>	<b>Vorteksien energia ja vuorovaikutus</b>	<b>G-15</b>
<b>H</b>	<b>Vorteksien välinen voima</b>	<b>I-18</b>
<b>I</b>	<b>Useamman vorteksin lukkiutuminen samaan lukkiutumiskeskukseen</b>	<b>I-19</b>
<b>J</b>	<b>Vorteksien termodynamiikkaa</b>	<b>J-21</b>
	J.1 Alempi kriittinen kenttä . . . . .	J-22
	J.2 Ylempi kriittinen kenttä . . . . .	J-24
<b>K</b>	<b>Vorteksien viruminen</b>	<b>K-26</b>
<b>L</b>	<b>Kriittinen virrantiheys</b>	<b>L-28</b>
<b>M</b>	<b>Matemaattisia tuloksia</b>	<b>M-29</b>
	M.1 Vektori-identiteetti nro. 1 . . . . .	M-29
	M.2 Vektori-identiteetti nro. 2 . . . . .	M-30
	M.3 Helmholtzin yhtälön ratkaisu . . . . .	M-30

## Johdanto

Suprajohteet ovat yli 100 vuoden takaisesta löytymisestään lähtien olleet intensiivisen tutkimuksen kohteena. Syynä tähän on poikkeuksellisen laaja määrä niitä hyödyntäviä sovelluskohteita, joihin lukeutuu mm. mittalaitteita, sähkömagneetteja sekä erityisesti kvanttietokoneissa hyödynnettäviä elektronisia komponentteja. Yli 30 vuotta sitten löydetty korkean lämpötilan suprajohteet loivat sijaa myös mahdollisille kaupallisille sovelluksille. Suhteellisen helposti saavutettavasta transitiolämpötilasta huolimatta korkean lämpötilan suprajohteiden mahdollisten sovellusten määrää rajoittaa niiden hauras keraaminen rakenne. Useista tunnetuista korkean lämpötilan suprajohteista  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$  (YBCO) on osoittautunut kaupallisten sovellusten kannalta lupaavimmaksi, sillä sitä osataan kasvattaa ohutkalvoksi tätä varten suunnitellun metallinauhan päälle. Tämä mahdollistaa YBCO:n hyödyntämisen useissa pitkiä, kestäviä ja taipuvia siirtolinjoja vaativissa sovelluksissa.

Useat korkean lämpötilan suprajohteiden sovellukset hyödyntävät korkeissa ulkoisissa magneettikentissä toimivia ohutkalvorakenteita. Ulkoinen magneettikenttä pystyy tunkeutumaan korkean lämpötilan suprajohteiden läpi pylväsmäisinä vortekseina. Suprajohteen läpi johdettava siirtovirta saa puolestaan vorteksit liikkumaan johtaen tehohäviöihin. Vorteksien haitallista liikettä voidaan hallita dooppaamalla suprajohtavaa materiaalia lukkiutumiskeskuksiksi kutsuttavilla ei-suprajohtavilla epäpuhtauksilla, joihin vorteksit lukkiutuvat paikoilleen siirtovirran ollessa tarpeeksi pieni. Hyvin tehdyn dooppauksen avulla voidaan moninkertaistaa suprajohteen kriittinen virta, jonka tulisi olla sovellusten kannalta niin korkea kuin mahdollista.

Suprajohteen dooppaaminen erilaisilla nanopartikkeleilla on osoittautunut tehokkaaksi tavaksi lukita vortekseja ja kasvattaa materiaalin kriittistä virtaa. Vorteksien lukkiutumistehokkuuteen vaikuttavat etenkin nanopartikkelien materiaali, koko, muoto, orientaatio sekä dooppauskonsentraatio. Dooppauksella on kuitenkin haitallinen vaikutus muihin materiaalin suprajohtaviin ominaisuuksiin. Suuret doop-

pauskonsentraatiot voivat madaltaa materiaalin kriittistä kenttää ja lämpötilaa merkittävästi. Tästä syystä edellä mainitut doopattavien nanopartikkelien parametrit on optimoitava eri sovelluskohteille sopiviksi.

Tietokonesimulaatiot tarjoavat rajattomat mahdollisuudet tutkia vorteksien lukkiutumisen dynamiikkaa erilaisiin keinotekoisii lukkiutumiskeskuksiin. Ne mahdollistavat dooppauksen nopean ja halvan optimoinnin fysikaalisiin mittauksiin verrattuna säästäten yhteiskunnalta paljon resursseja. Tästä syystä simulointia suositetaan myös ensisijaisena menetelmänä uusien lukkiutumiskeskusten ja rakenteiden kartoittamiseen. Simulaatiot tarjoavat lisäksi erinomaisen mahdollisuuden verrata fysikaalista teoriaa kokeellisiin tuloksiin, mikä nostaa niiden merkitystä osana tieteellistä tutkimusta. Kokeellisen tutkimuksen ohella simulaatiot tarjoavatkin yksityiskohtaista tietoa vorteksien lukkiutumismekanismeista, joka on välttämätöntä entistä parempien materiaalien kehityksen kannalta. Simulaatioissa on kuitenkin vaikeaa huomioida kaikkia vuon lukkiutumiseen vaikuttavia tekijöitä, kuten todellisuudessa ilmeneviä lukkiutumiskeskusten koon, muodon ja orientaation vaihteluja sekä suprajohtavan materiaalin hilassa ilmeneviä kidevirheitä. Simulaatioiden avulla lasketut tulokset vastaavatkin usein vain hyvin idealisoituja tilanteita, jolloin niiden hyvä vastaavuus kokeellisiin tuloksiin ei ole taattua.

Tässä tutkielmassa tarkastellaan kolumnaaristen lukkiutumiskeskusten koon ja konsentraation vaikutusta YBCO-ohutkalvojen kriittisen virran riippuvuuteen ulkoisen magneettikentän suunnasta.  $\text{BaHfO}_3$  (BHO) ja  $\text{BaSnO}_3$  (BSO) nanopartikkeilla doopatut YBCO-ohutkalvot mahdollistivat edellä mainittujen parametrien vaikutuksen kokeellisen mittaamisen. Kokeellisesti mitattuja tuloksia verrataan tutkielman osana suoritettuihin molekyylidynamiikkasimulaatioihin, mikä auttaa ymmärtämään kriittisen virran riippuvuutta ulkoisen magneettikentän suunnasta. Tämän odotetaan tarjoavan apua entistä parempien suprajohtomateriaalien kehitykseen sekä kasvattamaan niitä hyödyntävien sovelluskohteiden määrää.



# 1 Suprajohtavuus

## 1.1 Yleiset ominaisuudet

Suprajohteet ovat materiaaleja, joiden resistiivisyys laskee nollaan kriittisen lämpötilan alapuolella. Tällöin materiaalin sanotaan olevan suprajohtavassa tilassa. Kriittisen lämpötilan arvo riippuu vallitsevasta ulkoisesta magneettikentästä. Vastaavasti voidaan määritellä kriittinen magneettikenttä, jonka alapuolella tietyssä lämpötilassa oleva materiaali muuttuu suprajohtavaksi. Suprajohteet voidaan jakaa magneettisten ominaisuuksiensa perusteella tyypin I ja II suprajohteisiin. Tyypin I suprajohteet käyttäytyvät suprajohtavassa tilassa täydellisen diamagneetin tavoin, estäen ulkoisen magneettikentän tunkeutumisen materiaalin sisälle. Ne koostuvat tyypillisesti vain yhdestä alkuaineesta ja ovat hilarakenteeltaan tavallisesti hyvin yksinkertaisia [1]. Tässä tutkielmassa käsiteltävien tyypin II suprajohteiden magneettiset ominaisuudet ovat puolestaan monimutkaisempia, ja niihin tutustutaan tarkemmin seuraavissa luvuissa. Tyypin II suprajohteiden kriittinen lämpötila on usein selvästi suurempi verrattuna tyypin I suprajohteisiin. Tämä tekee niistä erittäin tärkeän tutkimuskohteen lukuisten sovellusten kannalta. Suprajohteet voidaan luokitella myös korkean ja matalan lämpötilan suprajohteisiin, jotka poikkeavat toisistaan kriittisten lämpötilojen lisäksi myös suprajohtavuuden syntymekanismin osalta.

Matalan lämpötilan suprajohteille kehitetty mikroskooppinen BCS-teoria selittää suprajohtavuuden syntymekanismin kyseisissä materiaaleissa fononiviritteisten s-elektronien pariutumisen avulla. Lähellä Fermipintaa sijaitsevat elektronit minimoivat energiansa muodostaen ns. Cooperin pareja kokiessaan pienenkin attraktiivisen voiman toisiaan kohtaan. Kyseinen voima on puolestaan peräisin elektronien vuorovaikutuksesta materiaalin hilarakenteen kanssa [2]. BCS teoria ei kykene selittämään suprajohtavaa faasitransitiota korkean lämpötilan tyypin II suprajohteissa. Sen sijaan ennen perustavanlaatuista BCS teoriaa kehitetty fenomenologinen

Ginzburg-Landau-teoria (lyh. GL-teoria) on osoittautunut käyttökelpoiseksi sekä korkean että matalan lämpötilan suprajohteille. Toisin kuin BCS-teoria, GL-teoria ennustaa kaikki eri suprajohteiden ominaisuudet, joita käsitellään perustavanlaatuisesti seuraavissa luvuissa. Korkean lämpötilan suprajohteiden mikroskooppinen teoria pysyy silti avoimena ongelmana [1].

## 1.2 Tyypin II suprajohteet

Merkittävin ero tyypin I ja II suprajohteiden välillä on tyypin II suprajohteiden esiintyminen kahdessa eri magneettisessa faasissa. Kyseisten faasien väliset transitiot riippuvat vallitsevasta lämpötilasta  $T$  sekä ulkoisen magneettikentän voimakkuudesta  $H$ . Tyypin II suprajohteista puhuttaessa määritellään tavallisesti tiettyä lämpötilaa vastaava alempi kriittinen kenttä  $H_{c1}$  sekä ylempi kriittinen kenttä  $H_{c2}$ . Kun  $H < H_{c1}$ , käyttäytyy tyypin II suprajohde täydellisen diamagneetin tavoin estäen ulkoisen magneettikentän tunkeutumisen materiaalin sisälle. Kun  $H_{c1} < H < H_{c2}$ , on tyypin II suprajohde yhä suprajohtavassa tilassa, mutta se sallii ulkoisen magneettikentän tunkeutumisen lävitseen ns. vorteksien muodossa. Tällöin suprajohteen sanotaan olevan sekatilassa (engl. mixed state) [1].

Tyypin II suprajohteet ovat tavallisesti rakenteeltaan paljon monimutkaisempia ja niiden kriittinen lämpötila on usein huomattavasti suurempi tyypin I suprajohteisiin verrattuna. Tietyillä tyypin II suprajohteisiin lukeutuvilla materiaaleilla kriittinen lämpötila on poikkeuksellisen korkea. Näihin ns. kupraatteihin viitataan usein korkean lämpötilan suprajohteina. Eräs kupraatteihin kuuluva materiaali on tässä tutkielmassa käsiteltävä YBCO, jonka ominaisuuksia käsitellään tarkemmin seuraavissa luvuissa.

### 1.3 Ginzburg-Landau-teoria

Fenomenologinen Ginzburg-Landau-teoria kykenee selittämään kaikki tyypin I ja II suprajohteiden ominaisuudet. GL-teoria olettaa, että lähellä normaalin ja suprajohtavan faasin transitiolämpötilaa  $T_c$ , Gibbsin vapaan energian tiheys,  $G$ , voidaan kirjoittaa muodossa

$$G(\phi) = G_n + \frac{1}{V} \int \left[ \frac{1}{2m} (-i\hbar\nabla + e \mathbf{A}) \phi^* (i\hbar\nabla + e \mathbf{A}) \phi + \frac{\mathbf{B}^2(\mathbf{r})}{2\mu_0} - \mu_0 \mathbf{H}(\mathbf{r}) \mathbf{M}(\mathbf{r}) + a\phi\phi^* + \frac{1}{2}b\phi\phi^*\phi\phi^* + \dots \right] dV, \quad (1)$$

jossa  $V$  on näytteen tilavuus,  $\mathbf{B}$  on ulkoinen magneettikenttä ja  $\mathbf{A}$  sitä kuvaava vektoripotentiaali,  $\mathbf{H}$  on magneettikentän voimakkuus,  $\mathbf{M}$  on magnetisaatio,  $m$  ja  $e$  ovat elektronien efektiivinen massa ja varaus sekä  $\phi$  on kompleksinen järjestysparametri (engl. order parameter). Järjestysparametrin yleinen muoto on

$$\phi(\mathbf{r}) = |\phi(\mathbf{r})| e^{i\theta(\mathbf{r})}, \quad (2)$$

jossa  $\theta(\mathbf{r})$  on järjestysparametrin vaihe. Liitteessä A.1 on osoitettu, kuinka järjestysparametrin yksikäsitteisyydestä seuraa tärkeä tulos

$$\oint \nabla\theta(\mathbf{r}) d\mathbf{l} = 2\pi n, \quad n \in \mathbb{Z}, \quad (3)$$

jota hyödynnetään tulevissa luvuissa. GL-teoria olettaa myös, että järjestysparametrin itseisarvon neliöstä voidaan laskea supraelektronien tiheys

$$n_s = |\phi|^2. \quad (4)$$

Fenomenologisten parametrien  $a$  ja  $b$  oletetaan olevan riippumattomia järjestysparametrin. Liitteessä A.2 on perusteltu, että parametrin  $a$  on kuitenkin oltava riippuvainen lämpötilasta kaavan

$$a(T) = a_0 \left[ \frac{T}{T_c} - 1 \right] \quad (5)$$

mukaisesti parametrin  $b$  ollessa riippumaton myös lämpötilasta. Gibbsin vapaa energia pyrkii minimiinsä NTP-ensemblen termodynaamisessa tasapainotilassa, jossa systeemin ainemäärä, paine ja lämpötila pysyy vakioina [3], joten sen derivaatta järjestysparametrin  $\phi^*$  ja vektoripotentiaalin  $\mathbf{A}$  suhteen häviää. Varioimalla yhtälöä (1) erikseen em. suureiden suhteen päädytään ns. Ginzburg-Landau-yhtälöihin [4]

$$\begin{cases} \frac{1}{2m} (\hbar^2 \nabla^2 \phi - 2i\hbar e \mathbf{A} \cdot \nabla \phi - e^2 \mathbf{A}^2 \phi) - a\phi - b|\phi|^2 \phi = 0 \\ \mu_0 \mathbf{J} = -\frac{i\hbar e}{2m} (\phi^* \nabla \phi - \phi \nabla \phi^*) - \frac{e^2}{m} \mathbf{A} |\phi|^2, \end{cases} \quad (6)$$

jotka eri alkuehdoilla ratkaisemalla selittävät kaikki suprajohteilla havaittavat ilmiöt. GL-yhtälöiden johtaminen on esitetty perustavanlaatuisesti liitteessä A. Yhtälöiden (6) ratkaisuihin perehdytään tarkemmin seuraavissa luvuissa.

## 1.4 Tyypin II suprajohde ulkoisessa magneettikentässä

Tässä kappaleessa tarkastellaan korkean lämpötilan suprajohteen käyttäytymistä ulkoisessa magneettikentässä edellisessä kappaleessa esitettyjen GL-yhtälöiden avulla kahdessa eri tapauksessa. Ensimmäisessä tapauksessa tarkastellaan tilannetta, jossa ulkoinen magneettikenttä on pienempi kuin alempi kriittinen kenttä. Tällöin suprajohde on ns. Meissnerin tilassa, jonka ominaisuudet ovat samat tyypin I ja II suprajohteilla. Tämän jälkeen perehdytään kriittisten kenttien välissä sijaitsevaan sekatilaa ja siinä ilmenevien vorteksien ominaisuuksiin.

### 1.4.1 Meissnerin tila ja tunkeutumissyvyys

Alempaa kriittistä kenttää pienemmillä ulkoisen kentän arvoilla tyypin II suprajohde on Meissnerin tilassa. Tällöin suprajohteen sisällä vallitsevan supraelektronien tiheyden voidaan olettaa pysyvän vakiona. Tällöin järjestysparametrin itseisarvo ja vaihe pysyvät myös vakioina paikan funktiona. Matemaattisesti ilmaistuna

$$\nabla |\phi(\mathbf{r})| e^{i\theta(\mathbf{r})} = 0. \quad (7)$$

Liitteessä B on osoitettu, kuinka kyseisen alkuehdon avulla virrantiheyden GL-yhtälö (6) voidaan kirjoittaa yksiulotteiseen muotoon

$$\frac{d^2}{dx^2}A_y(x) = \frac{1}{\lambda_L^2}A_y(x), \quad (8)$$

jossa on määritelty suprajohtavien materiaalien tärkeäksi parametriksi osoittautuva tunkeutumissyvyys (engl. penetration depth)

$$\lambda_L = \sqrt{\frac{m}{\mu_0 e^2 |\phi|^2}}. \quad (9)$$

Tunkeutumissyvyyden voidaan edellä mainittujen perustelujen avulla olettaa pysyvän vakiona syvällä suprajohtavan materiaalin sisällä. Kyseisen parametrin fysikaalinen merkitys tulee selville ratkaisemalla yhtälö (9). Ratkaisusta

$$A_y(x) = A_0 e^{-x/\lambda_L} \quad (10)$$

voidaan päätellä, että vektoripotentiaali, magneettikenttä sekä virrantiheys pienenevät eksponentiaalisesti siirryttäessä suprajohtavan materiaalin rajapinnalta suprajohteen sisälle. Ulkoinen magneettikenttä ei siis käytännössä kykene tunkeutumaan Meissnerin tilassa olevan suprajohteen sisälle reunoja lukuunottamatta ja näyte on täydellisessä diamagneettisessa tilassa. Ratkaisun (10) avulla voidaan todeta, että tunkeutumissyvyys edustaa ulkoisen magneettikentän heikkenemisen nopeutta paikan funktiona. Mitä suurempi tunkeutumissyvyys suprajohteella on, sitä pidemmälle ulkoinen magneettikenttä kykenee tunkeutumaan suprajohteen sisälle. Tunkeutumissyvyys on jokaiselle suprajohteelle ominainen parametri, jonka arvo usein vaihtelee anisotrooppisen materiaalin eri kidesuunnissa [1, 5].

#### 1.4.2 Vorteksit

Alemman ja ylemmän kriittisen kentän välillä olevilla ulkoisten kenttien arvoilla tyyppin II suprajohteet ovat sekatilassa, jossa magneettikenttä tunkeutuu suprajohteen

läpi vortekseina. Suprajohteen sisällä supraelektronien tiheyden voidaan olettaa pysyvän vakiona. Järjestysparametrin avulla edellä mainittu oletus voidaan kirjoittaa muodossa

$$\nabla|\phi(\mathbf{r})| = 0. \quad (11)$$

Tällä kertaa järjestysparametrin vaihe  $\theta(\mathbf{r})$  voi kuitenkin vaihdella paikan funktiona. Liitteessä D on osoitettu, miten alkuehdon (11) ja järjestysparametrin yksikäsitteisyyslauseen (94) avulla virrantiheyden GL-yhtälö voidaan kirjoittaa muotoon

$$\frac{m}{e^2} \frac{\mu_0}{|\phi|^2} \oint \mathbf{J} \cdot d\mathbf{l} + \oint \mathbf{A} \cdot d\mathbf{l} = n \frac{h}{e}. \quad (12)$$

Saatu yhtälö on yleisesti tunnettu magneettivuon kvantittumisehto, jonka mukaan mikä tahansa magneettivuo voi saada vain arvoja, jotka ovat magneettivuon kvantin

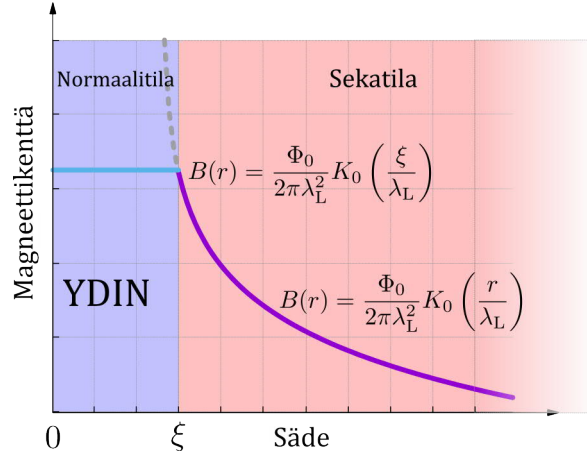
$$\Phi_0 = \frac{h}{e} \quad (13)$$

monikertoja. Edellisessä luvussa pääteltiin virrantiheyden ja vektoripotentialin lähestyvän eksponentiaalisesti nollaa siirryttäessä suprajohteen rajapinnalta sen sisälle. Tämän tuloksen avulla yhtälön (12) viivaintegraalit on helppo laskea. Liitteessä D on esitetty, miten kyseinen yhtälö redusoituu lopulta muotoon

$$\mathbf{B} = \lambda_L^2 \nabla^2 \mathbf{B}. \quad (14)$$

Saatu yhtälö tunnetaan fysiikassa toisena ns. Londonin yhtälöistä. Matematiikassa se tunnetaan Helmholtzin yhtälönä. Kyseinen yhtälö kuvaa ulkoisen magneettikentän käyttäytymistä suprajohteen sisällä. Olettamalla suprajohtava materiaali homogeeniseksi ja isotrooppiseksi sekä sen läpäisevä magneettikenttä sylinterisymmetriseksi, voidaan yhtälön (14) ratkaisu kirjoittaa muodossa

$$B(r) = \begin{cases} \frac{\Phi_0}{2\pi\lambda_L^2} K_0\left(\frac{\xi}{\lambda_L}\right) & r \leq \xi \\ \frac{\Phi_0}{2\pi\lambda_L^2} K_0\left(\frac{r}{\lambda_L}\right) & r \geq \xi, \end{cases} \quad (15)$$



Kuva 1. Vorteksin muoto. Vaaleansininen viiva kuvaa vorteksin magneettikenttää ytimessä, kun taas violetti käyrä kuvaa vorteksin kenttää ytimen ulkopuolella. Vorteksin keskipiste on asetettu origoon.

jossa  $K_0(r)$  on nollannen asteen modifiotu Besselin funktio ja parametri

$$\xi = \sqrt{\frac{\hbar^2}{2ma}} \quad (16)$$

on materiaalille ominainen koherenssipituus. Londonin yhtälön ratkaisun yksityiskohdat on esitetty liitteissä E ja M.3. Koherenssipituus on tunkeutumissyvyyden ohella toinen suprajohteita karakterisoiva etäisyys. Se voidaan tulkita välimatkakksi, jolla järjestysparametrin  $\phi(\mathbf{r})$  arvo suprajohteen sisällä vaihtelee merkittävästi [1, 5]. Koherenssipituuden fysikaalista merkitystä on tarkasteltu analyyttisesti liitteessä C. Kuvassa 1 on havainnollistettu ratkaisun (15) mukainen suprajohteen läpäisevän vorteksin muoto sen säteen funktiona. Vorteksi muodostuu  $\xi$ -säteisestä ytimestä, jossa magneettikenttä on vakio. Yleisen käsityksen mukaan vorteksin ytimen alueella oleva materiaali on ei-suprajohtavassa normaalitilassa. Ytimen ulkopuolella magneettikentän voimakkuus putoaa likimain logaritmisesti säteen funktiona lähestyen nollaa. Liitteessä E.1 on esitetty Londonin yhtälön ratkaisu yksinkertaisessa anisotrooppisessa materiaalissa, jossa tunkeutumissyvyyden arvot poikkeavat toisistaan vain yhdessä kidesuunnassa. Tällöin vorteksin poikkileikkauksesta tulee ellipsi [5].

### 1.4.3 Sekatila

Edellisessä luvussa nähtiin, miten magneettikenttä tunkeutuu tyypin II suprajohteen läpi vorteksin muodossa. Tarkastellaan seuraavaksi vorteksin ytimen ulkopuolista aluetta ja sen ominaisuuksia. Vorteksin magneettikenttään varastoitunut energia homogeenisessä ja isotrooppisessa materiaalissa voidaan tunnetusti laskea integroimalla magneettikentän energiatiheyttä

$$U = \frac{1}{2\mu} \int_V B^2 dV. \quad (17)$$

Luvussa 1.4.1 todettiin, että Meissnerin tilassa oleva aine käyttäytyy täydellisen diamagneetin tavoin. Tämä tarkoittaa, että aineen suhteellinen permeabiliteetti  $\mu = 0$ . Kaavan (17) perusteella vorteksin kenttään varastoitunut energia olisi tällöin ääretön, mikä on täysin epäfysikaalinen tilanne. Vorteksien lävistäessä suprajohteen on materiaalin oltava ns. sekatilassa, jossa sen suhteellinen permeabiliteetti voi saada arvoja väliltä  $0 < \mu \ll \mu_0$  [1].

Yhtälön (17) mukaan vorteksin energia on verrannollinen sen magneettikentän neliöön. Ulkoisen magneettikentän on siis energeettisesti edullisempaa tunkeutua suprajohteen läpi useiden eri vorteksien avulla, joiden magneettivuon arvot ovat mahdollisimman pieniä. Edellä esitetyn magneettivuon kvantittumisyhtälön (12) mukaan suprajohteen läpi tunkeutuva magneettivuo koostuu aina magneettivuon kvantin  $\Phi_0$  monikerroista. Tämän perusteella voidaan olettaa yksittäisen vorteksin magneettivuon saavan nimenomaan pienimmän mahdollisen arvon  $\Phi_0 = h/e$  [1]. Suprajohteen lävistävien vorteksien määrän on havaittu olevan suoraan verrannollinen ulkoisen magneettikentän suuruuteen [6]. Vorteksien tiheys siis kasvaa ulkoisen magneettikentän voimakkuutta nostettaessa. Lopulta vorteksien tiheys on niin suuri, että ne ovat osittain toistensa päällä ja materiaali siirtyy sekatilasta normaalitilaan. Kyseiseen faasitransitioon tutustutaan tarkemmin seuraavassa luvussa.



#### 1.4.4 Faasidiagrammi

Edellisissä luvuissa todettiin, että tyypin II suprajohteet voivat esiintyä kahdessa eri magneettisessa faasissa. Meissnerin tilassa tyypin II suprajohteet käyttäytyvät täydellisen diamagneetin tavoin, kun taas sekatilassa ulkoinen magneettikenttä tunkeutuu materiaalin läpi vortekseina. Tyypin II suprajohteille on siis olennaista määrittellä kaksi kriittistä magneettikenttää ja lämpötilaa. Tavallisesti kuitenkin puhutaan vain alemmasta ja ylemmästä kriittisestä kentästä.

Alempaa kriittistä kenttää  $H_{c1}$  pienemmillä ulkoisen magneettikentän arvoilla tyypin II suprajohteet esiintyvät Meissnerin tilassa. Liitteissä J ja J.1 on esitetty miten yksinkertaisen termodynaamisen mallin avulla voidaan  $H_{c1}$ :n ja tunkeutumis- syvyyden välille kirjoittaa yhtälö [1, 5]

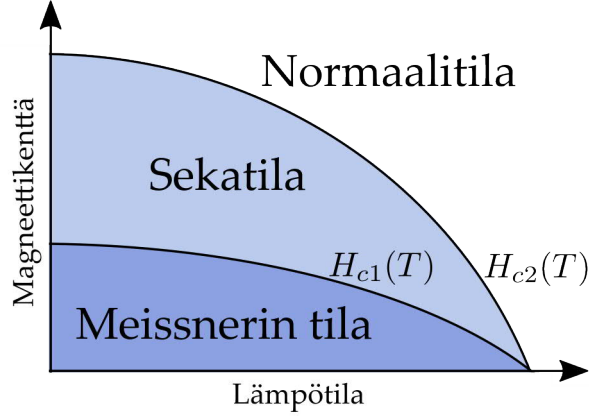
$$H_{c1} = \frac{\Phi_0}{4\pi\mu_0\lambda_L^2} K_0 \left( \frac{\xi}{\lambda_L} \right). \quad (18)$$

Alemman kriittisen kentän arvo on tasan puolet yksittäisen vorteksin ytimen kentän arvosta. Faasitransitio Meissnerin tilasta sekatilaan tapahtuu siis hieman ennen ensimmäisen vorteksin muodostumista.

Ulkoisen magneettikentän ollessa alemman ja ylemmän kriittisen kentän välissä tyypin II suprajohte esiintyy sekatilassa. Liitteessä J.2 on esitetty miten GL-teorian avulla voidaan johtaa ylemmän kriittisen kentän olevan verrannollinen koherenssipituuteen kaavan

$$H_{c2} = \frac{\Phi_0}{2\pi\mu_0\xi^2} \quad (19)$$

osoittamalla tavalla. Saatu yhtälö antaa paljon tietoa vorteksien käyttäytymisestä seka- ja normaalitilan välisessä faasitransitiossa. Korkeilla kentillä toisiaan hylkivät vorteksit pyrkivät maksimoimaan etäisyytensä  $r$  toisistaan järjestäytyen heksagonaaliseen hilarakenteeseen, jonka yksikkökopin ala on  $2/r^2\sqrt{3}$ . Yksittäisen vorteksin läpäisevä vuo on aina  $\Phi_0$ , jolloin suprajohteen läpäisevä keskimääräinen magneettikentän voimakkuus on  $\langle H \rangle = 2\Phi_0/\mu_0 r^2\sqrt{3}$ . Ulkoisen kentän kasvaessa vorteksien



Kuva 2. Tyypin II suprajohteen magneettinen faasidiagrammi.

tiheys kasvaa ja niiden välinen etäisyys pienenee. Ääritilanteessa vorteksien ytimet koskevat toisiaan, jolloin niiden välinen etäisyys  $r = 2\xi$ . Tällöin näytteen läpäisevä keskimääräinen magneettivuon voimakkuus on

$$\langle B \rangle = \frac{\Phi_0}{2\mu_0\xi^2\sqrt{3}}, \quad (20)$$

joka vastaa hyvällä tarkkuudella GL-teorian tuottamaa tulosta [5].

Kriittisten kenttien kaavoissa (18) ja (19) esiintyvä tunkeutumissyvyys ja kohe-  
renssipituus ovat molemmat riippuvaisia vallitsevasta lämpötilasta, joten myös kriit-  
tiset kentät ovat lämpötilariippuvaisia. Kriittisten kenttien lämpötilariippuvuutta  
on havainnollistettu kuvassa 2 esitettyssä faasidiagrammissa [5]. Faasidiagrammista  
havaitaan, että kriittisten kenttien arvot laskevat lämpötilan funktiona. Molemmat  
kriittiset kentät saavuttavat teoreettisen maksimiarvonsa absoluuttisessa nollopis-  
teessä. Matalissa lämpötiloissa  $H_{c1}(T)$  ja  $H_{c2}(T)$  pysyvät likimain vakioina, kun taas  
kokeammissa lämpötiloissa niiden arvot vaihtelevat nopeammin lämpötilan funktio-  
na. Tyypin II suprajohteita hyödyntävien sovellusten kannalta on edullista, että  
hyödynnettävä materiaali pysyy suprajohtavassa tilassa mahdollisimman korkeas-  
sa ulkoisessa kentässä ja lämpötilassa. Kuvan 2 faasidiagrammin mukaan näiden  
suureiden välillä on kuitenkin tehtävä kompromissi. Tavallisesti korkean lämpötilan

suprajohteiden sovellukset suosivat enemmän korkeaa kriittistä magneettikenttää kuin lämpötilaa. Sekatilassa oleva materiaali pysyy suprajohtavassa tilassa paljon suuremmilla kenttien ja lämpötilojen arvoilla, minkä takia se on tyypin II suprajohteiden tutkimuksessa erityisen mielenkiinnon kohteena.

## 1.5 Vorteksiin kohdistuvat voimat

### 1.5.1 Jännitysvoima

Suprajohtavassa materiaalissa liikkuvat vorteksit voivat lukkiutumiskeskuksen kohdatessaan venyä ja taipua erilaisiin muotoihin. Vorteksin on kuitenkin energeettisesti edullisempaa olla suorassa ulkoisen magneettikentän suuntaisesti. Tästä seuraa, että vorteksin eri osien välillä vaikuttava jännitysvoima (engl. line tension) pyrkii suorittamaan vorteksin. Kyseisen voiman yhtälö voidaan johtaa lähtemällä liikkeelle yksittäisen vorteksin kokonaisenergiasta. Tässä kappaleessa suoritettua kaavan johdon välivaiheet on esitetty yksityiskohtaisemmin liitteessä G.

Vorteksin kokonaisenergia muodostuu sen magneettikenttään varastoituneesta energiasta sekä vorteksin keskipistettä kiertävien supraelektronien liike-energiasta. Näiden energioiden summa voidaan laskea kaavasta

$$E = \frac{1}{2\mu} \int_{V_s} [\mathbf{B}^2 + \mu_0 \mathbf{J}_s \cdot \Lambda \mathbf{J}_s] dV, \quad (21)$$

jossa matriisi  $\Lambda$  huomioi materiaalissa mahdollisesti esiintyvän anisotropian. Yhtälö (21) voidaan kirjoittaa pinta- ja viivaintegraalien avulla muodossa

$$E = \frac{1}{2\mu} \int_{V_s} \mathbf{B} \cdot \mathbf{V} dV + \frac{1}{2\mu} \oint_{S_s} [\mathbf{B} \times (\Lambda \mathbf{J}_s)] \cdot d\mathbf{S} \quad (22)$$

määrittelemällä hyödyllinen pyörteisyysvektori  $\mathbf{V}(\mathbf{r}) = \mathbf{B} + \nabla \times (\Lambda \mathbf{J}_s)$ . Liitteessä F on osoitettu, että pyörteisyysvektori voidaan esittää kaksiulotteisen Diracin delta-funktion avulla muodossa

$$\mathbf{V}(\mathbf{r}) = \Phi_0 \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_V) \mathbf{e}_V, \quad (23)$$

jossa  $\mathbf{e}_V$  on vorteksin ytimen kentän suuntainen yksikkövektori. Pyörteisyysvektori on siis nolasta poikkeava ainoastaan vorteksin keskipisteessä  $\mathbf{r}_V$ . Vorteksin energia pituusyksikköä kohti voidaan laskea vähentämällä yhtälössä (22) esiintyvien integraalien asteita, jolloin tilavuusintegraali muuttuu pintaintegraaliksi ja pintaintegraali muuttuu viivaintegraaliksi. Energiaksi pituusyksikköä kohti saadaan

$$\frac{E}{L} = \frac{1}{2\mu} \int_{S_s} \mathbf{B} \cdot \mathbf{V} dS + \frac{1}{2\mu} \oint_{C_s} [\mathbf{B} \times (\Lambda \mathbf{J}_s)] \cdot d\mathbf{l}. \quad (24)$$

Suljetun viivaintegraalin reitti voidaan valita äärettömän kauas vorteksin keskipisteestä, jossa vorteksin kenttä ja supraelektronien virta ovat mielivaltaisen pieniä. Yhtälössä (24) esiintyvä viivaintegraali siis katoaa, ja vorteksin energia pituusyksikköä kohti voidaan laskea pintaintegraalista

$$\frac{E}{L} = \frac{1}{2\mu} \int_{S_s} \mathbf{B} \cdot \mathbf{V} dS \quad (25)$$

sijoittamalla  $\mathbf{B}(\mathbf{r})$ :n paikalle kappaleessa 1.4.2 johdettu vorteksin yhtälö (15). Pyörteisyysvektorin  $\mathbf{V}(\mathbf{r})$  määritelmästä seuraa, että yhtälön (25) integrandi katoaa kaikissa tason  $S_s$  pisteissä vorteksin keskipistettä lukuunottamatta. Tämä tekee pintaintegraalista helpon laskea. Tuloksena saadaan [1, 5]

$$\frac{E}{L} = \frac{\Phi_0^2}{4\pi\mu\lambda_L^2} K_0 \left( \frac{\xi}{\lambda_L} \right) \approx \frac{\Phi_0^2}{4\pi\mu\lambda_L^2} \ln \left( \frac{\lambda_L}{\xi} \right). \quad (26)$$

Tähän asti tehty käsittely on koskenut ainoastaan jonkin hila-akselin kanssa yhden-suuntaisia vortekseja. YBCO:n tapauksessa yleisen kulmassa  $\alpha$  sen  $ab$ -hilatasoon nähden olevan vorteksin kokonaisenergialle saadaan yhtälö

$$E = L \frac{\varepsilon_v \Phi_0^2}{4\pi\mu\lambda_L^2} \ln \left( \frac{\lambda_L}{\varepsilon_v \xi_{ab}} \right), \quad (27)$$

jossa  $\varepsilon_v$  on ns. Blatterin skaalausparametri [7]

$$\varepsilon_v = \sqrt{\frac{\sin^2 \alpha}{\gamma} + \cos^2 \alpha} \quad (28)$$

ja  $\gamma \approx 5.0$  on YBCO:n anisotropiaparametri. Koherenssipituudella  $\xi_{ab}$  viitataan YBCO:n  $ab$ -hilatason suuntaiseen arvoon [8]. Jännitysvoima (engl. line tension) vorteksin osien A ja B välillä saadaan laskettua derivoimalla yhtälö (27) kyseisten osien välisen etäisyyden  $\Delta \mathbf{r} = \mathbf{r}_A - \mathbf{r}_B$  suhteen. Tässä tutkielmassa käytetyssä simulaatiossa vorteksia mallinnettiin toisiinsa kytkettyjen partikkelien jonolla, jossa yksittäinen partikkeli liikkuu omassa YBCO:n  $ab$ -tason suuntaisessa kerroksessa. Simulaatiota varten tarvitsee laskea ainoastaan jännitysvoiman  $ab$ -tason suuntainen komponentti, jonka suuruudeksi saadaan

$$f^j = -\frac{\epsilon_0 r (\gamma^2 - 1 + \ln \kappa)}{d \gamma^2 \sqrt{d^2 + r^2}}, \quad (29)$$

jossa  $\epsilon_0 = \Phi_0^2 / 4\pi\mu\lambda_L^2$  on vorteksin perusenergia pituusyksikköä kohden,  $\kappa = \lambda_L / \xi$  on Ginzburg-Landau-parametri,  $r = \Delta r_{ab}$  on kahden vorteksipartikkelin välinen etäisyys  $ab$ -tason suunnassa ja  $d = \Delta r_c$  on kyseisten partikkelien välinen etäisyys  $c$ -akselin suunnassa [8].

### 1.5.2 Vorteksien välinen voima

Edeltävässä kappaleessa johdettua yhtälöä (25) voidaan käyttää myös kahden vorteksin systeemiin varastoituneen potentiaalienergian laskemiseen. Olkoon kyseiset vorteksit pisteissä  $\mathbf{r}_1$  ja  $\mathbf{r}_2$ , jolloin niiden muodostama kokonaiskenttä ja pyörteisyysvektori voidaan esittää superpositiona

$$\begin{cases} \mathbf{B}(\mathbf{r}) = \frac{\Phi_0}{2\pi\lambda_L^2} \left[ K_0 \left( \frac{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_1|}{\lambda_L} \right) + K_0 \left( \frac{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_2|}{\lambda_L} \right) \right] \mathbf{e}_i \\ \mathbf{V}(\mathbf{r}) = [\Phi_0 \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1) + \Phi_0 \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_2)] \mathbf{e}_i. \end{cases} \quad (30)$$

Edellisen luvun tapaan, yhtälön (25) integrandi katoaa kaikissa tason  $S_s$  pisteissä paitsi vorteksien keskipisteissä. Pintaintegraali on jälleen helppo laskea ja kahden vorteksin systeemin kokonaisenergiaksi saadaan

$$E = \frac{L\Phi_0^2}{2\pi\mu_0\lambda_L^2} K_0 \left( \frac{\xi}{\lambda_L} \right) + \frac{L\Phi_0^2}{2\pi\mu_0\lambda_L^2} K_0 \left( \frac{r}{\lambda_L} \right). \quad (31)$$

Saadun yhtälön ensimmäinen termi on edeltävästä kappaleesta tutun kahden yksittäisen vorteksin energioiden summa. Jälkimmäinen termi voidaan siten tulkita kahden vorteksin väliseksi vuorovaikutusenergiaksi. Vorteksien välinen vuorovaikutusenergia pienenee kun niiden välinen etäisyys  $r$  kasvaa. Vorteksit siis hylkivät toisiaan. Vorteksien välinen repulsiovoima voidaan laskea derivoimalla yhtälö (31) vorteksien välisen etäisyyden  $r$  suhteen. Besselin funktioiden rekursiorelaatiota hyödyntämällä saadaan voimaksi [5, 8]

$$f^{vv} = \frac{\Phi_0^2}{2\pi\lambda^2} K_1 \left( \frac{r}{\lambda_L} \right), \quad (32)$$

jossa  $K_1(r)$  on ensimmäisen asteen modifioitu Besselin funktio. Besselin funktiota voidaan approksimoida pienillä ja suurilla etäisyyksillä yhtälöillä

$$K_1 \left( \frac{r}{\lambda} \right) \approx \begin{cases} \frac{\lambda_L}{r}, & \text{kun } r \ll \lambda_L \\ \frac{e^{-r/\lambda_L}}{\sqrt{r/\lambda_L}}, & \text{kun } r \gg \lambda_L. \end{cases} \quad (33)$$

Yllä esitettyjen yhtälöiden perusteella on selvää, että vorteksien välinen vuorovaikutus on olematonta suurilla etäisyyksillä. Repulsiovoimat tulevat merkittäviksi vasta vorteksien ytimien välimatkojen ollessa paljon pienempiä kuin vastaavan materiaalin tunkeutumissyvyys. YBCO:n tapauksessa  $\lambda_L \approx 150$  nm, jolloin vorteksien väliset voimat kasvavat merkittäviksi niiden välisen etäisyyden ollessa kymmenien nanometrien luokkaa.

### 1.5.3 Kitkavoima

Suprajohtavassa materiaalissa liikkuvaan vorteksiin vaikuttaa ilmanvastuksen kanssa analoginen liikettä vastustava kitkavoima. Kitkavoimat ovat tyypillisesti suoraan verrannollisia liikkuvan kappaleen nopeuteen yhtälön

$$\mathbf{f}^k = -\eta \mathbf{v} \quad (34)$$

osoittamalla tavalla, jossa  $\eta$  on materiaalille ominainen kitkatermi (engl. drag coefficient). Kitkatermille voidaan johtaa yleinen yhtälö tarkastelemalla vakionopeudella liikkuvaa vorteksia. Vorteksiin kohdistuu kitkavoiman (34) lisäksi siirtovirran  $\mathbf{J}$  aikaansaama Lorentzin voima

$$\mathbf{f}^L = \mathbf{J} \times \Phi_0 \mathbf{e}_V. \quad (35)$$

Tasapainotilassa vakionopeudella liikkuvaan vorteksiin vaikuttavien voimien summa on klassisen dynamiikan mukaisesti nolla. Asettamalla Lorentzin voima yhtäsuureksi tämän kumoavan kitkavoiman kanssa saadaan yksikkövektorin  $\mathbf{e}_V$  suuntaisen vorteksin liikeyhtälöksi [9]

$$\mathbf{J} \times \Phi_0 \mathbf{e}_V = \eta \mathbf{v}. \quad (36)$$

Liikkuvan vorteksin normaalitilassa olevaan ytimeen indusoituu Faradayn lain mukaisesti sähkökenttä

$$\mathbf{E} = \mathbf{B} \times \mathbf{v}, \quad (37)$$

jonka avulla normaalitilassa pätevä Ohmin laki voidaan kirjoittaa muotoon [5, 9]

$$\mathbf{J} = \sigma_0 \mathbf{E} = \sigma_0 (\mathbf{B} \times \mathbf{v}). \quad (38)$$

Yllä olevassa yhtälössä  $\sigma_0$  on materiaalin sähkönjohtavuus. Sijoittamalla Ohmin lain mukainen ilmaisu (38) vorteksin liikeyhtälöön (36) saadaan

$$\sigma_0 (\mathbf{B} \times \mathbf{v}) \times \Phi_0 \mathbf{e}_V = \eta \mathbf{v}. \quad (39)$$

Vorteksin kentän ollessa kohtisuorassa siirtovirtaan ja vorteksin nopeuteen nähden, voidaan yhtälöstä (39) ratkaista kitkatermiksi

$$\eta = \sigma_0 B \Phi_0. \quad (40)$$

Kitkatermin arvolle saadaan hyvä arvio asettamalla ulkoisen magneettikentän suuruudeksi ylemmän kriittisen kentän arvo. Esittämällä vielä johtavuus resistiivisyyden käänteisarvona saadaan kitkatermin suuruudelle yleisesti hyväksytty yhtälö [8, 10]

$$\eta = \frac{B_{c2}\Phi_0}{\rho_0}, \quad (41)$$

jonka avulla voidaan laskea liikkuvaan vorteksiin kohdistuva kitkavoima.

#### 1.5.4 Ulkoisen kentän aiheuttama voima

Vorteksin energia ulkoisessa magneettikentässä  $\mathbf{B}_u$  voidaan laskea kaavasta

$$E_B = -\Phi_0 \mathbf{e}_V \times \mathbf{H} = -\Phi_0 \mathbf{e}_V \times (\mu_0 \mathbf{B}_u) = -\Phi_0 \mu_0 B_u \cos \varphi, \quad (42)$$

jossa  $\varphi$  on vorteksin ja ulkoisen kentän välinen kulma. Vorteksiin kohdistuvan voiman suuruus voidaan laskea derivoimalla yllä oleva yhtälö etäisyyden  $r$  suhteen, jolloin saadaan [8]

$$f^{\text{mag}} = \Phi_0 \mu_0 B_u \frac{d\varphi}{dr} \sin \varphi. \quad (43)$$

Voiman  $f^{\text{mag}}$  suuruus kasvaa vorteksin ja ulkoisen kentän välisen kulman kasvaessa pyrkien jännitysvoiman tavoin suoristamaan vorteksin ulkoisen magneettikentän suuntaiseksi.

#### 1.5.5 Lukkiutumismoima

Suprajohtavassa materiaalissa olevat hilan epäpuhtaudet laskevat vorteksien energiaa ja täten kohdistavat niihin attraktiivisen voiman lukiten ne paikoilleen. Kolumnaarisen lukkiutumiskeskuksen vorteksiin kohdistaman voiman laskemiseksi on ensin tarkasteltava kuinka paljon vorteksin energia pienenee paikan funktiona lukkiutumiskeskuksen läheisyydessä. Tarkastellaan etäisyydellä  $R$  koordinaatiston ori-



gossa sijaitsevasta lukkiutumiskeskuksesta olevaa vorteksia. Lukkiutumiskeskuksesta supraelektronien tiheyden voidaan olettaa pienenevän kaavan

$$1 - \phi^2(|\mathbf{r} - \mathbf{R}|) \quad (44)$$

osoittamalla tavalla. Järjestysparametria vorteksin ytimessä voidaan edelleen approksimoida kirjoittamalla [11]

$$\phi(|\mathbf{r} - \mathbf{R}|) = \phi(R') \approx \frac{R'}{\sqrt{R'^2 + 2\xi^2}} e^{i\theta}, \quad (45)$$

jossa  $R'$  on etäisyys vorteksin ytimestä. Supraelektronien tiheys pienenee lukkiutumiskeskuksen läheisyydessä pienentäen vorteksin energiaa kaavan

$$\varepsilon(R) = -\frac{1}{2}\mu_0 H_c^2 \int \int [1 - \phi^2(|\mathbf{r} - \mathbf{R}|)] r dr d\varphi \quad (46)$$

mukaisesti. Yhtälöä (46) voidaan siis ajatella lukkiutumiskeskuksen lukitsemispotentiaalina. Approksimaatiossa (45) esiintyvä etäisyys  $R'$  voidaan esittää sylinterikoordinaatiston säteen  $r$  sekä vorteksin ja origossa sijaitsevan lukkiutumiskeskuksen välisen etäisyyden  $R$  avulla hyödyntämällä kosinilauseetta

$$R'^2 = r^2 + R^2 - 2rR \cos \varphi. \quad (47)$$

Sijoittamalla  $r$ :n funktiona kirjoitettu järjestysparametri (45) vorteksin energian yhtälöön (46) saadaan

$$\varepsilon(R) = -\frac{\varepsilon_0}{2\pi} \int_0^r \int_0^{2\pi} \frac{1}{r^2 + R^2 - 2rR \cos \varphi + 2\xi^2} r dr d\varphi. \quad (48)$$

Integroimalla energian yhtälö  $\varphi$ :n suhteen saadaan

$$\begin{aligned} \varepsilon(R) &= -\varepsilon_0 \int_0^r \frac{1}{\sqrt{(r^2 + R^2 + 2\xi^2 + 2rR)(r^2 + R^2 + 2\xi^2 - 2rR)}} r dr \\ &= -\varepsilon_0 \int_0^r \frac{1}{\sqrt{(r^2 + R^2 + 2\xi^2 + 2rR) + 8\xi^2 R^2}} r dr, \end{aligned} \quad (49)$$

joka edelleen  $r$ :n suhteen integroimalla voidaan kirjoittaa muotoon

$$\begin{aligned} \varepsilon(R) &= -\frac{\varepsilon_0}{2} \operatorname{arcsinh} \left[ \frac{1}{2} \frac{(r^2 + R^2 + 2\xi^2)}{\sqrt{2\xi} R} \right] \Big|_0^r \\ &= -\frac{\varepsilon_0}{2} \left\{ \left[ \frac{1}{2} \left( \frac{\sqrt{2\xi}}{R} \right) \frac{(r^2 - R^2 + 2\xi^2)}{2\xi^2} \right] - \left[ \frac{1}{2} \left( \frac{\sqrt{2\xi}}{R} \right) \frac{(-R^2 + 2\xi^2)}{2\xi^2} \right] \right\}. \end{aligned} \quad (50)$$

Saatua lukkiutumisen energian yhtälöä voidaan approksimoida sen Taylorin sarjakehitelmän pienimmän kertaluvun termillä

$$\varepsilon(R) \approx \varepsilon(0) + \frac{\varepsilon_0}{2} \frac{r^2 R^2}{(r^2 + 2\xi^2)^2}. \quad (51)$$

Lukkiutumisvoima voidaan nyt laskea derivoimalla yhtälö (51) vorteksin ja lukkiutumiskeskuksen välisen etäisyyden  $R$  suhteen, jolloin päädytään yhtälöön

$$f^{\text{vp}}(R) = \varepsilon_0 \frac{r^2 R}{(r^2 + 2\xi^2)^2}. \quad (52)$$

YBCO:n anisotropia voidaan ottaa huomioon skaalaamalla koherenssipituuden arvo luvussa 1.5.1 esitetyn Blatterin skaalausparametrin  $\varepsilon_v(\alpha)$  avulla, jolloin vorteksin kokemaksi lukkiutumispotentiaaliksi saadaan [12]

$$f^{\text{vp}}(R, \alpha) = \varepsilon_0 \frac{r^2 R}{(r^2 + 2\varepsilon_v \xi_{ab}^2)^2}. \quad (53)$$

Yllä olevassa kaavassa lukkiutumiskeskuksen oletetaan olevan YBCO:n  $c$ -hila-akselin suunnassa ja kulmalla  $\alpha$  viitataan vorteksin kentän ja YBCO:n  $ab$ -hilatason väliseen kulmaan. Kyseinen yhtälö pätee hyvin lukkiutumiskeskuksille, joiden säde on välillä  $R < \sqrt{2}\xi$ . Yhtälöä voidaan kuitenkin käyttää hyvänä approksimaationa myös tätä suurempien lukkiutumiskeskusten vortekseihin kohdistaman voiman laskemiseen [8].

## 1.6 Vorteksien lukkiutuminen

Luvussa 1.4.2 tarkasteltiin miten magneettikenttä tunkeutuu sekatilassa olevan suprajohteen läpi vortekseina. Sekatilassa oleva suprajohde ei kuitenkaan takaa häviötöntä virrankulkua materiaalin läpi, koska vorteksien magneettikenttä vuorovaikuttaa suprajohteen läpi kulkevan siirtovirran kanssa. Kyseinen vuorovaikutus kohdistaa vortekseihin Lorentzin tyyppisen voiman pakottaen ne liikkeelle. Vorteksien liike puolestaan tuottaa tehohäviöitä [5], joihin tutustutaan tarkemmin seuraavassa luvussa. Tästä syystä vortekseja pyritään lukitsemaan paikoilleen lisäämällä suprajohdetaan materiaaliin lukkiutumiskeskuksiksi kutsuttavia epäpuhtauksia. Kehittämäl-

lä parempia lukkiutumiskeskuksia voidaan maksimoida suprajohteen läpi kulkeva tehohäviötön virta.

### 1.6.1 Tehohäviöt

Sekatilassa olevan suprajohteen läpi kulkeva siirtovirta  $\mathbf{J}$  kohdistaa yksikkövektorin  $\mathbf{e}_V$  suuntaiseen vorteksiin Lorentzin voiman

$$\mathbf{f}_L = \mathbf{J} \times \Phi_0 \mathbf{e}_V, \quad (54)$$

joka saa vorteksin liikkumaan nopeudella  $v$  siirtovirtaa ja ulkoista kenttää vastaan kohtisuorassa suunnassa. Yksittäisen vorteksin liikkeen aiheuttama paikallinen magneettivuon muutos on täten

$$d\Phi \sim \Phi_0 dv dt, \quad (55)$$

jossa  $d$  on materiaalin leveys ulkoista magneettikenttää vastaan kohtisuorassa suunnassa. Faradayn lain mukaan kyseinen magneettivuon muutos aiheuttaa siirtovirran suunnassa mitattavan jännite-eron

$$V = \frac{\partial \Phi}{\partial t} = \Phi_0 dv, \quad (56)$$

josta aiheutuvan tehohäviön suuruus on [5]

$$P = IV = I\Phi_0 dv, \quad (57)$$

jossa  $I$  on virrantiheyttä  $\mathbf{J}$  vastaava virta. Sekatilassa ei siis vorteksien liikkeen takia voida saavuttaa täysin häviötöntä virrankulkua. Mikäli siirtovirran vorteksiin kohdistama Lorentzin voima (54) saadaan eliminoitua vastavoiman  $\mathbf{f}_p$  avulla, vorteksit pysyisivät paikallaan ja tehohäviöitä ei syntyisi. Kyseinen vastavoima voidaan luoda esimerkiksi dooppaamalla suprajohtavaan näytteeseen lukkiutumiskeskuksia, joihin vorteksit kiinnittyvät paikoilleen.

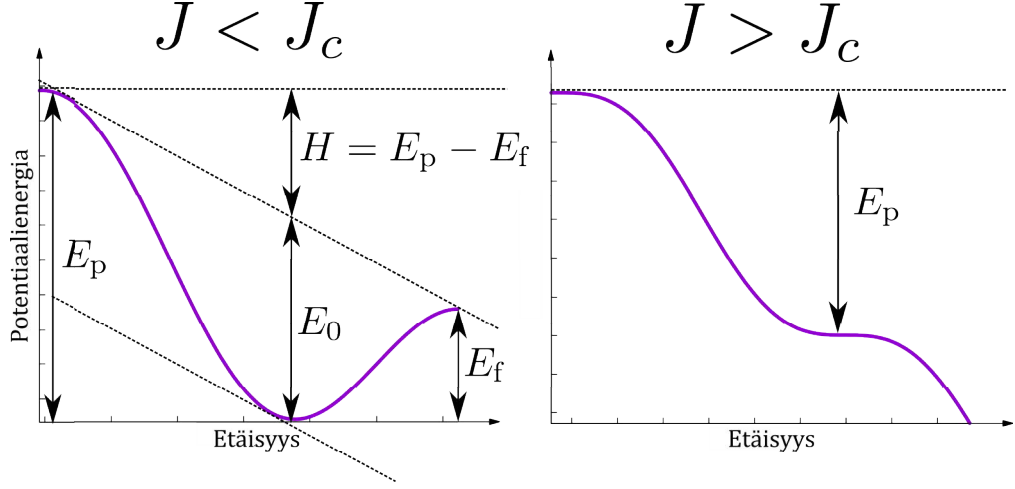
### 1.6.2 Kriittinen virrantiheys ja vuon viruminen

Kriittisen lämpötilan ja magneettikentän lisäksi suprajohteilla on myös kriittinen virrantiheys. Tyypin I suprajohteilla kriittisellä virrantiheydellä tarkoitetaan suurinta häviötöntä siirtovirtaa pinta-alayksikköä kohti, joka voidaan johtaa suprajohdetaan materiaaliin. Tätä suuremmilla virran arvoilla tapahtuu faasitransitio takaisin normaalitilaan. Suprajohteen kriittinen virrantiheys on seurausta sen kriittisestä magneettikentästä. Suprajohteen läpi kulkeva siirtovirta luo ympärilleen magneettikentän Amperen lain mukaisesti. Faasitransitio tapahtuu kyseisen virran aiheuttaman kentän ylittäessä kriittisen kentän arvon [1]. Liitteessä L on johdettu kriittisen virrantiheyden riippuvan materiaalin tunkeutumissyvyydestä kaavan

$$J_c = \frac{\Phi_0}{3\sqrt{3}\pi\mu_0\lambda_L^2\epsilon} \quad (58)$$

osoittamalla tavalla, jonka mukaan kriittinen virrantiheys on kääntäen verrannollinen tunkeutumissyvyyden neliöön. Materiaalin anisotropialla on siis suuri vaikutus kriittisen virrantiheyden arvoon. YBCO:n tapauksessa  $\lambda_{ab} \approx 120$  nm ja  $\lambda_c \approx 800$  nm [13], jolloin *ab*-tason suunnassa saavutetaan huomattavasti korkeampi kriittinen virta *c*-akselin suuntaan nähden.

Tyypin II suprajohteille kriittinen virrantiheys on määriteltävä hieman eri tavalla. Edellisessä kappaleessa todettiin, että sekatilassa olevan suprajohteen läpi kulkeva siirtovirta saa sen läpäisevät vorteksit liikkumaan johtaen tehohäviöihin. Kriittinen virrantiheys määritellään edelleen suurimmaksi mahdolliseksi suprajohteen läpi kulkevaksi häviöttömäksi virraksi, mutta sen arvoa ei rajoita enää tyypin I suprajohteiden tapaan virran indusoima kriittinen magneettikenttä. Sen sijaan kriittisen virran arvon määräävät vortekseja paikallaan pitävien lukkiutumiskeskusten niihin kohdistamat voimat. Ideaalisessa tapauksessa vorteksit pysyvät paikoillaan ja kriittinen virrantiheys vastaa tyypin I suprajohteille määriteltyä virtaa. Vorteksien liikkeestä johtuen kyseinen virta on kuitenkin käytännössä aina ideaalista tapausta pienempi, mutta sen arvoa voidaan kasvattaa lukitsemalla vortekseja entistä tehokkaammin.



Kuva 3. Lukkiutumiskeskuksen potentiaaliakuopan muoto virrantiheyden ollessa pienempi ja suurempi kuin vallitseva kriittinen virrantiheys.

Liitteessä K on osoitettu, että tyypin II suprajohteen läpi kulkeva kriittinen virta ei pysy vakiona, vaan pienenee logaritmisesti ajan funktiona. Tämä on seurausta kuvassa 3 havainnollistetusta siirtovirran vaikutuksesta lukkiutumiskeskuksen vorteksille aiheuttaman potentiaaliakuopan muotoon. Kuvassa siirtovirta saa vorteksit liikkumaan vasemmalta oikealle ja lukkiutumiskeskuksen keskipiste vastaa potentiaalienergiakäyrän minimiä tai satulapistettä. Siirtovirran ollessa kriittistä virtaa pienempi, vorteksit lukkiutuvat kuvan 3 vasemmassa graafissa esitettyyn potentiaaliakuoppaan, josta paetakseen niillä on oltava vapautumisenergiaa  $E_f$  suurempi energia. Vapautumisenergia on Boltzmannin statistiikan mukaisesti verrannollinen lukkiutuneiden vorteksien vapautumisnopeuteen. Siirtovirta  $J$  pienentää lineaarisesti vorteksin vapautumisenergian  $E_f$  arvoa yhtälön

$$E_f = E_0 \left( 1 - \frac{J}{J_c} \right) \quad (59)$$

osoittamalla tavalla. Kuvan 3 oikeassa graafissa on puolestaan esitetty tapaus, jossa materiaalin läpi johdettava siirtovirta vastaa näytteen kriittistä virtaa. Tällöin vorteksien vapautumisenergia  $E_f = 0$ , jolloin vorteksit eivät kiinnity lukkiutumis-

keskuksiin. Molemmissa edellä mainituissa tapauksissa kuvassa 3 havainnollistettu vapaiden vorteksien lukkiutumisenopeuteen verrannollinen lukkiutumisenenergia  $E_p$  on kuitenkin sama. Lukkiutumis- ja vapautumisenergioiden erotus  $H$  on täten verrannollinen vapaiden vorteksien lukumäärään Boltzmannin statistiikan mukaisesti kaavan [14]

$$n_f \sim e^{-H/kT} \quad (60)$$

osoittamalla tavalla. Lukkiutuneita vortekseja vapautuu siis termisen aktivoinnin seurauksena jopa kriittistä virtaa pienemmillä siirtovirran arvoilla johtaen nk. magneettivuon virumiseen (engl. flux creep), mikä puolestaan aiheuttaa tehohäviöitä. Lämpötilaa pienentämällä voidaan kuitenkin varsin tehokkaasti hallita haitallista vuon virumista. Suuren kriittisen virran ja lämpötilan välillä on siis tehtävä kompromissi. Tavallisesti korkean lämpötilan suprajohteiden sovellukset suosivat mahdollisimman suurta kriittisen virrantiheyttä, kunhan kyseistä virtaa vastaava lämpötila on käytännön toteutusta varten tarpeeksi korkea.

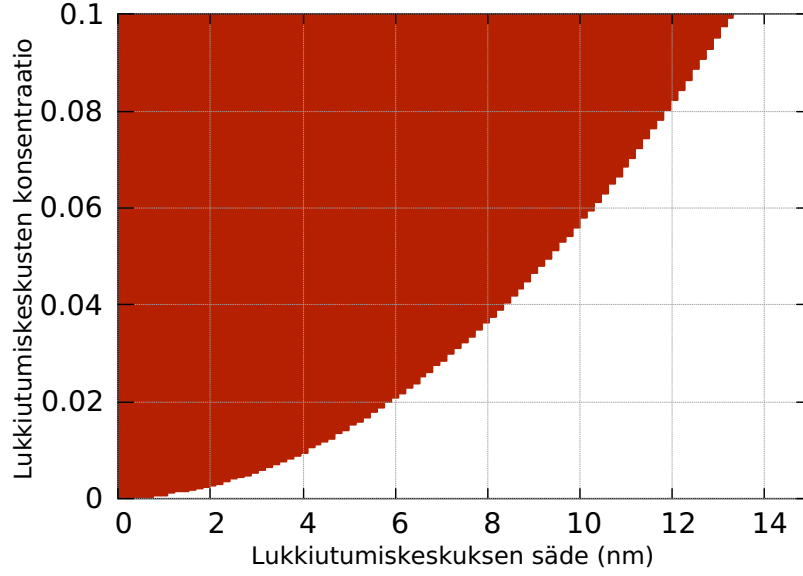
### 1.6.3 Lukkiutuneiden vorteksien välinen vuorovaikutus

Kappaleessa 1.5.2 todettiin vorteksien vuorovaikuttavan keskenään vain hyvin pienillä etäisyyksillä vorteksien ytimien välimatkan ollessa paljon pienempi kuin vastaavan materiaalin tunkeutumissyvyys. Tarkastellaan seuraavaksi millä dooppauskonsentraatiolla lukkiutumiskeskukset ovat niin lähekkäin, että niissä olevat vorteksit kokisivat merkittävän, yhtälön (32) mukaisen, repulsiovoiman.

Lukkiutumiskeskusten dooppauskonsentraatio  $n$  voidaan esittää lukkiutumiskeskusten kokonaispinta-alan ja näytteen kokonaispinta-alan  $A_N$  suhteena

$$n = \frac{N_0 \pi R^2}{A_N}, \quad (61)$$

jossa  $N_0$  ja  $R$  on lukkiutumiskeskusten kokonaismäärä ja säde. Yhtälöstä (61) voidaan ratkaista näytteessä olevien lukkiutumiskeskusten määräksi konsentraation



Kuva 4. Lukkiutumiskeskusten säteitä vastaavat konsentraatiot, joilla lukkiutumiskeskusten välinen välimatka on pienempi kuin puolet YBCO:n tunkeutumissyvyydestä  $\lambda_L/2 \approx 75$  nm. Punaisella alueella lukkiutuneiden vorteksien välinen vuorovaikutus on merkittävä, kun taas valkoisella alueella se on todella pientä.

funktiona

$$N_0 = \frac{nA_N}{\pi R^2}. \quad (62)$$

Oletetaan, että lukkiutumiskeskukset ovat jakautuneet näytteeseen tasaisin välimatkoin, jolloin yksittäisen lukkiutumiskeskuksen valtaama alue on

$$A_P = \frac{A_N}{N_0} = \frac{A_N}{\left(\frac{nA_N}{\pi R^2}\right)} = \frac{\pi R^2}{n}. \quad (63)$$

Lukkiutumiskeskusten välinen etäisyys  $d$  konsentraation funktiona on arviolta

$$d \approx \sqrt{A_P} = \sqrt{\frac{\pi R^2}{n}} \sim \frac{R}{\sqrt{n}}. \quad (64)$$

Kuvassa 4 on esitetty millä lukkiutumiskeskusten säde-konsentraatioyhdistelmillä lukkiutuneet vorteksit voivat merkittävästi vuorovaikuttaa keskenään. Punaisella

alueella vorteksien väliset repulsiovoimat alentavat efektiivisesti niiden lukkiutumisko-  
voimaa. Kriittisen virrantiheyden voidaan täten olettaa saavan korkeampia arvoja  
valkoisella alueella. Lukkiutumiskeskusten tiheyden vaikutusta kriittiseen virranti-  
heyteen tarkastellaan seuraavassa luvussa.

#### 1.6.4 Vorteksien lukkiutumisen statistiikkaa

Tässä kappaleessa tarkastellaan vorteksin lukinneiden lukkiutumiskeskusten luku-  
määrän suhdetta lukkiutumiskeskusten kokonaismäärään. Tilanne on analyttinen  
Irving Langmuiren luoman kaasujen adsorboitumista pinnoille kuvaavan mallin kans-  
sa [15]. Kyseiseen arvoon viitataan jatkossa miehityslukuna  $\Theta \in [0, 1]$ . Lukkiutumis-  
nopeus  $R_p$ , eli vapaista lukkiutuneiksi muuttuvien vorteksien määrä aikayksikössä,  
on intuitiivisesti verrannollinen vorteksien kokonaismäärään  $N_V$  sekä lukkiutumis-  
keskuksiin saapuvien vorteksien nopeuksiin  $v_V$ . Tämän lisäksi lukkiutumismopeuteen  
täytyy vaikuttaa lukkiutumiskeskusten dooppauskonsentraatio  $n$  sekä todennäköi-  
syys  $p_L$ , jolla vapaasta vorteksista tulee lukkiutunut lukkiutumiskeskukseen kohda-  
tessaan. Voidaan siis kirjoittaa, että

$$R_p \sim N_V \cdot v_V \cdot n \cdot p_L. \quad (65)$$

Vorteksien lukumäärän on osoitettu olevan on suoraan verrannollinen ulkoisen mag-  
neettikentän  $B$  suuruuteen [6], kun taas vorteksien nopeus on verrannollinen supra-  
johteen läpi kulkevaan virrantiheyteen  $J$ . Lukkiutumistodennäköisyys on Boltzman-  
nin statistiikan mukaisesti riippuvainen vallitsevasta lämpötilasta  $T$  sekä vapaan ja  
lukkiutuneen vorteksin välisestä energiaerosta  $E_p$ . Tämän lisäksi lukkiutumistoden-  
näköisyyden on oltava suoraan verrannollinen vapaiden lukkiutumiskeskusten mää-  
rään  $1 - \Theta$ , olettaen ettei kaksi vorteksia voi olla lukkiutuneena samaan lukkiutu-  
miskeskukseen. Lukkiutumistodennäköisyyden voidaan siis kirjoittaa olevan verran-  
nollinen  $p \sim (1 - \Theta) \exp(-E_p/kT)$ . Yllä lueteltujen argumenttien avulla voidaan



lukkiutumismopeuden yhtälö (65) kirjoittaa muotoon

$$R_p \sim BJn(1 - \Theta)e^{-E_p/kT}. \quad (66)$$

Lukkiutunut vorteksi voi myös päästä vapaaksi lukkiutumiskeskuksesta. Tätä varten on määriteltävä vapautumismopeus  $R_f$ , joka on analogisesti yllä esitetyn päätelyn kanssa verrannollinen Boltmannin tekijään sekä miehityslukuun  $\Theta$ . Tämän lisäksi  $R_f$ :hen vaikuttaa taajuus, jolla vorteksi yrittää irtautua lukkiutumiskeskuksesta potentiaaliukuopasta. Vorteksien välillä vallitsee hylkivä repulsiovoima, joten varattuun lukkiutumiskeskukseen saapuva vapaa vorteksi voi vapauttaa lukkiutuneen vorteksin työntämällä sen pois kyseisestä potentiaaliukuopasta. Vapautumismopeuden on siis oltava verrannollinen myös vallitsevaan virrantiheyteen. Voidaan siis kirjoittaa, että

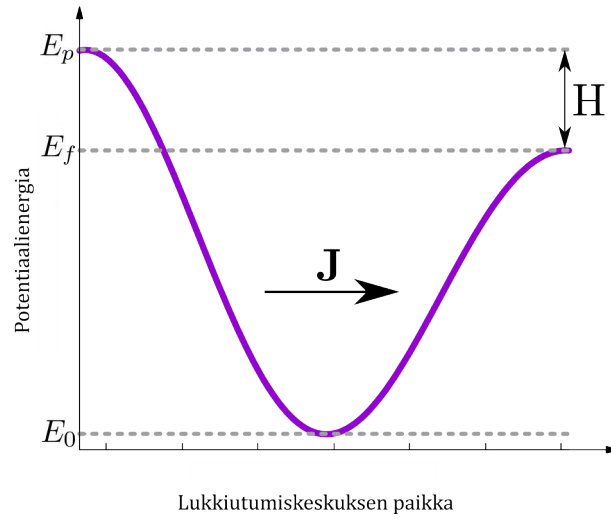
$$R_f \sim J\Theta e^{-E_f/kT}, \quad (67)$$

jossa parametri  $E_f$  on energia, jonka vorteksi tarvitsee vapautuakseen. Kyseinen energia on oletettava erisuureksi kuin yhtälössä (66) esiintyvä energia  $E_p$ , sillä sähkövirran aikaansaava ulkoinen potentiaaliero muokkaa lukkiutumiskeskuksesta potentiaaliukuopan muotoa niin, että  $E_f < E_p$ . Lukkiutumiskeskuksesta vorteksille aiheutaman potentiaaliukuopan muotoa on havainnollistettu kuvassa 5. On tärkeää huomioda, että lukkiutumiskeskukseen saapuvat vorteksit tulevat aina korkeamman energian puolelta kuvan 5 havainnollistamalla tavalla. Tasapainotilassa vorteksien lukkiutumis- ja vapautumismopeudet ovat yhtä suuria, jolloin yhtälöt (66) ja (67) voidaan kirjoittaa yhtäsuuriksi

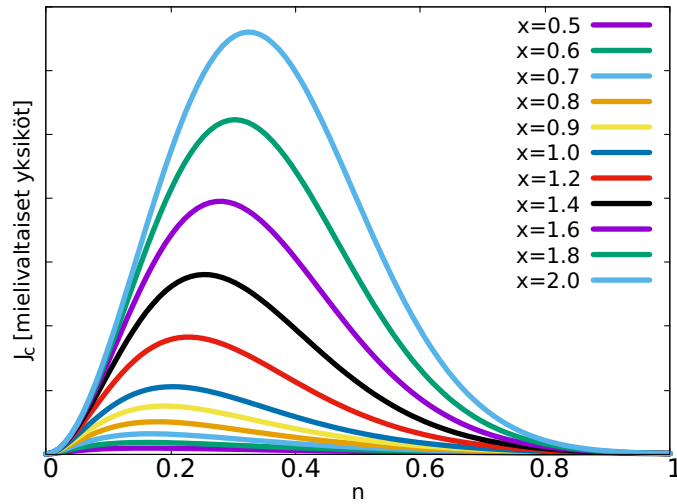
$$BJn(1 - \Theta)e^{-E_p/kT} = J\Theta e^{-E_f/kT} \iff \Theta = \frac{Bne^{-E_p/kT}}{Bne^{-E_p/kT} + e^{-E_f/kT}}. \quad (68)$$

Lukkiutuneiden vorteksien määrän  $n_p$  on osoitettu olevan verrannollinen kriittisen virrantiheyteen kaavan [16]

$$\frac{n_p}{n_v} \sim J_c \quad (69)$$



Kuva 5. Lukkiutumiskeskuksen vorteksille aiheuttaman potentiaaliuopan muoto. Kuvaan on merkitty virran suunta, johon suuntaan vorteksit myös liikkuvat.



Kuva 6. Kriittinen virrantiheys lukkiutumiskeskusten konsentraation funktiona eri parametrien  $H(n)$  arvoilla.

mukaisesti, jossa  $n_v$  on vorteksien kokonaismäärä. Kuten aikaisemmin todettiin, on vorteksien kokonaismäärä suoraan verrannollinen ulkoisen magneettikentän suuruuteen:  $n_v \sim B$ . Miehitysluku voidaan tämän ja relaation (69) avulla esittää muodossa

$$\Theta = \frac{n_p}{n} \sim \frac{J_c B}{n}, \quad (70)$$

jossa lukkiutumiskeskusten kokonaismäärää näytteessä on merkitty symbolilla  $n$ . Yhdistämällä nyt yhtälöt (68) ja (70), saadaan kriittiselle virrantiheydelle lauseke

$$J_c \sim \frac{n^2 e^{-E_p/kT}}{B n e^{-E_p/kT} + e^{-E_f/kT}} = \frac{n^2}{B n + e^{H/kT}}, \quad (71)$$

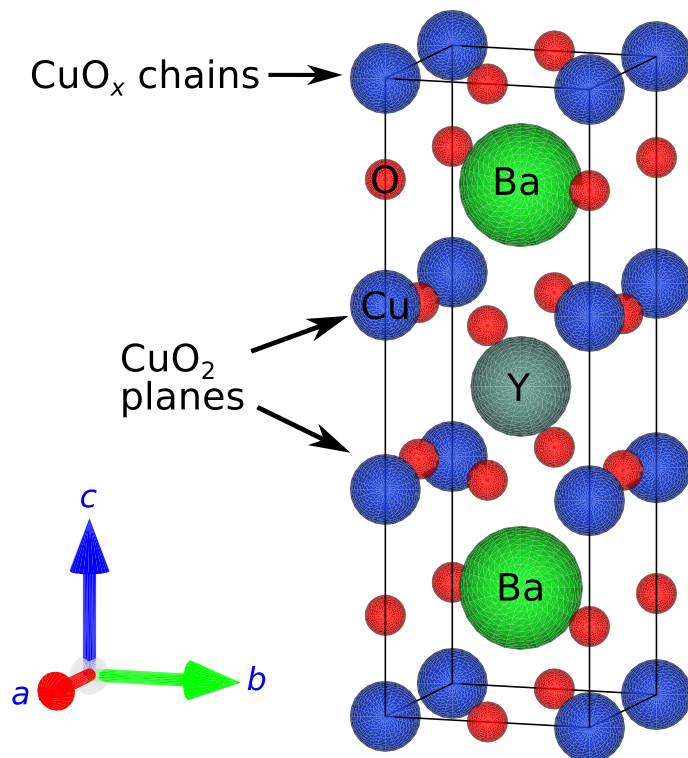
jossa  $H = E_p - E_f$  on lukkiutumis- ja vapautumisenergian erotus. Kyseisen energian arvoon vaikuttaa etenkin lähellä olevien vorteksien läsnäolo, joiden määrän on puolestaan oltava verrannollinen lukkiutumiskeskusten tiheyteen, sillä vapaasti liikkuvat vorteksit minimoivat energiansa olemalla mahdollisimman kaukana toisistaan. Parametrin  $H$  voidaan siis intuitiivisesti todeta olevan riippuvainen lukkiutumiskeskusten tiheydestä  $n$ . Yksinkertaisin oletus on, että  $H \sim n^x$ , missä  $x \in \mathbb{R}$ . Kuvassa 6 on esitetty yhtälön (71) ennustama kriittisen virrantiheyden riippuvuus lukkiutumiskeskusten konsentraatiosta eri  $H(n)$ :n arvoilla. Kuvaajien muodot vastaavat hyvin kokeellisia tuloksia [17, 18]. Kuvan 6 muotoiset  $n$ - $J_c$ -käyrät indikoivat, että yhteen lukkiutumiskeskukseen mahtuu ainoastaan yksi vorteksi. Liitteessä I on analysoitu miten useamman vorteksin lukkiutuminen samoihin lukkiutumiskeskuksiin muuttaisi edellä mainittujen käyrien muotoa.

## 2 YBCO

$\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$  eli yttriumbariumkuparioksidi (lyh. YBCO) on tyypin II korkean lämpötilan suprajohde. YBCO:n kriittinen lämpötila on 92 K [13] ja anisotrooppisesta rakenteesta johtuen sen kriittisten kenttien arvot vaihtelevat ulkoisen magneettikentän suunnan funktiona. Absoluuttisessa nollapisteessä YBCO:n ylempi kriittinen kenttä  $ab$ -hilatason suunnassa on jopa 674 T ja  $c$ -akselin suunnassa 122 T [19]. Erinomaisista suprajohtavista ominaisuuksista huolimatta YBCO:n hauras keräminen rakenne luo esteen sen hyödyntämiselle useimmissa käytännön sovelluksissa. YBCO sai kuitenkin sovellusten valossa etulyöntiaseman muihin korkean lämpötilan suprajohteisiin nähden kun sitä opittiin kasvattamaan ohutkalvoksi tätä varten

suunnitellun metallinauhan päälle. Tämä sallii YBCO:n hyödyntämisen useissa pitkiä, kestäviä ja taipuvia siirtolinjoja vaativissa sovelluksissa varsin edulliseen hintaan [18].

## 2.1 Rakenne



Kuva 7. YBCO:n yksikkökopin rakenne [20].

YBCO:lla on suprajohtavassa tilassa kuvassa 7 esitetty ortorombinen perovskiitirakenne, jonka yksikkökopin hilaparametrien arvot ovat luokkaa  $a \approx b \approx 3,8 \text{ \AA}$  ja  $c \approx 11,7 \text{ \AA}$  [13]. YBCO:n yksikkökopin rakenteessa on olennaista kerrosrakenne, joka muodostuu kahdesta  $ab$ -tason suuntaisesta  $\text{CuO}_2$ -tasosta. Nämä  $\text{CuO}_2$ -tasot on puristettu samansuuntaisten BaO ja Y-tasojen väliin. YBCO:n  $c$ -akselin suuntaiset  $\text{CuO}_x$ -ketjut yhdistävät edellä mainitut tasot toisiinsa kuvan 7 osoittamalla tavalla. Suprajohtavan virran on osoitettu kulkevan  $\text{CuO}_2$ -tasossa. Supraelektronit ovat puolestaan peräisin eristävistä BaO- ja Y-kerroksista sekä  $\text{CuO}_x$ -ketjuista.

$\text{CuO}_x$ -ketjujen happiatomien konsentraatiolla on suuri merkitys YBCO:n rakenteeseen ja suprajohtaviin ominaisuuksiin. Happiatomien dooppausasteen ollessa  $x < 0,3$ , esiintyy YBCO:n yksikkökoppi tetragonaalisessa muodossa, jossa suprajohtavaa transitiota ei havaita lainkaan. Korkeammilla dooppausasteilla  $x \gg 0,3$  YBCO:n hilarakenne on ortorombinen ja suprajohtava transiio voidaan havaita. Ortorombisen YBCO:n kriittinen lämpötila riippuu happiatomien dooppausasteesta  $6 + x$  ja on korkeimmillaan noin 92 K kun  $x \approx 0,95$ . Lisätty happi päätyy supraelektronien lähteenä toimiviin  $\text{CuO}_x$ -ketjuihin [1, 13, 20].

## 2.2 Vuon lukkiutuminen

Vorteksin kenttään varastoitunut energia voidaan laskea tunnetusta sähkömagnetismin miopin kaavasta

$$U = \frac{1}{2} \int_V \frac{\mathbf{B}^2(\mathbf{r})}{\mu(\mathbf{r})} dV, \quad (72)$$

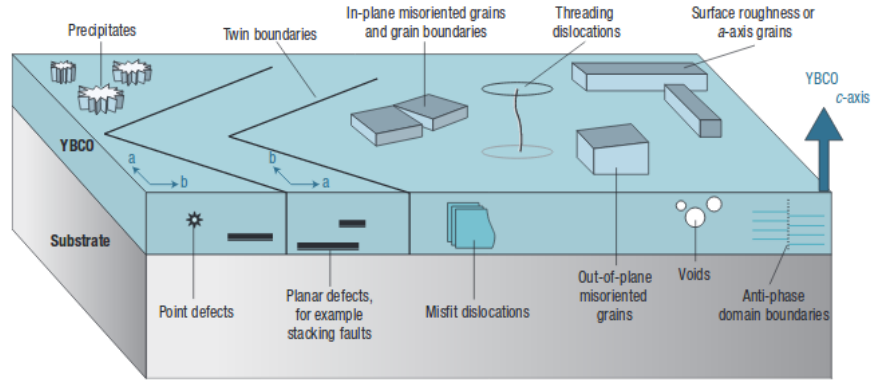
jossa  $\mu(\mathbf{r})$  on tilavuuden  $V$  sisällä olevassa pisteessä  $\mathbf{r}$  vallitseva suhteellinen permeabiliteetti. Vorteksin energia on siis kääntäen verrannollinen aineen permeabiliteettiin. Vorteksit pyrkivät luonnollisesti minimoimaan energiansa, jolloin ne jäävät loukkuun paljon suprajohtavaa materiaalia korkeamman suhteellisen permeabiliteetin omaaviin lukkiutumiskeskuksiin. Lukkiutumiskeskuksina toimivat siis hyvin materiaalit, joiden suhteellinen permeabiliteetti on mahdollisimman korkea.

Yhtälön (72) mukaan lukkiutuneen vorteksin energia pienenee myös lukkiutumiskeskuksen tilavuuden kasvaessa. Tämän lisäksi kentän suunnalla ja lukkiutumiskeskuksen orientaatiolla on suuri merkitys vorteksin energiaminimin arvoon. Tästä syystä materiaalin lukkiutumiso-minaisuuksia pyritään parantamaan dooppaamalla niitä eri muotoisilla ja kokoisilla keinotekoisilla lukkiutumiskeskuksilla. Lukkiutumiskeskusten dooppauksella on haitallinen vaikutus materiaalin suprajohtaviin ominaisuuksiin. Tästä syystä lukkiutumiskeskusten koko, muoto ja dooppauskonsentraatio on optimoitava eri suprajohteille ja niitä hyödyntäville sovelluskohteille

[18]. Suprajohdeohutkalvoissa esiintyy keinotekoisien lukkiutumiskeskusten lisäksi ns. luontaisia lukkiutumiskeskuksia, joiden ominaisuuksiin on hankalampi vaikuttaa. Edellä mainittujen lukkiutumiskeskustyyppien rakenteita ja ominaisuuksia käsitellään tarkemmin seuraavissa luvuissa.

### 2.2.1 Luontaiset lukkiutumiskeskukset

Luontaiset lukkiutumiskeskukset ovat sattumanvaraisesti suprajohtavan ohutkalvon yli jakaantuneita epäpuhtauksia ja kidevirheitä, jotka nostavat paikallisesti materiaalin suhteellisen permeabiliteetin arvoa lukiten vortekseja paikoilleen. Ne eivät korreloi keskenään toimien rakennuspalikkoina suuremmille rakenteille ja luontaisten lukkiutumiskeskusten tapauksessa puhutaankin ei-korreloidusta tai sattumanvaraisesta vuon lukkiutumisesta [18]. Luontaiset lukkiutumiskeskukset lukitsevat vortekseja tavallisesti paljon heikommin kuin seuraavassa luvussa käsiteltävät keinotekoiset lukkiutumiskeskukset. Yhden vorteksin lukkiutumiseen tarvitaankin tavallisesti useampi luontainen lukkiutumiskeskus. Tästä syystä luontaisiin lukkiutumiskeskuksiin viitataan usein myös heikkoina lukkiutumiskeskuksina [20]. Kyseisten lukkiutumiskeskusten sattumanvaraisesta jakaumasta seuraa, että kriittisen virran arvo pysyy likimain vakiona ulkoisen magneettikentän kulman funktiona materiaalin luontaisesta anisotropiasta aiheutuvaa virran kulmariippuvuutta lukuunottamatta [18]. Kuvassa 8 on havainnollistettu YBCO:ssa esiintyviä eri tyyppisiä luontaisia lukkiutumiskeskuksia. *Luontaiset saostumat* (engl. precipitates) aiheutuvat YBCO:n atomien konsentraation poikkeamasta niiden ideaalisesta suhteesta toisiinsa. Samanlainen vaikutus saadaan aikaiseksi dooppaamalla YBCO:a keinotekoisilla epäpuhtauskeskuksilla, jotka lukitsevat vortekseja tavallisesti luontaisia saostumia tehokkaammin. Saostumien kaltaiset *pistevirheet* (engl. point defects) ovat puolestaan saostumia paljon pienempiä atomien vääriä paikkoja aineen hilarakenteessa. *Kaksoskiderajat* (engl. twin boundaries) ovat ohutkalvoissa ilmeneviä laajoja tasomaisia lukkiu-



Kuva 8. YBCO:ssa esiintyviä luontaisia lukkiutumiskeskuksia [18].

tumiskeskuksia, joissa kaksi vierekkäistä YBCO:n yksikkökoppia ovat kohtisuorassa toisiaan nähden. Tavallisesti YBCO kasvaa substraatin päälle  $c$ -akselin suunnassa, jolloin kaksoskideraja ilmenee ohutkalvossa kuvan 8 osoittamalla tavalla. *Tasomaiset orientaatiovaihtelut* (engl. in-plane misorientations) ovat yleisiä huonosti teksturoituneiden substraattien päälle kasvatetuissa ohutkalvoissa. Kyseiset lukkiutumiskeskuksukset ilmenevät paikoissa, joissa vierekkäisten yksikkökoppien hila-akselien suunnat poikkeavat toisistaan hieman luoden väliinsä eräänlaisen nanotyhjiön. *Ruuvidislokaatiot* (engl. threading dislocations) ovat seurausta YBCO:n ja substraatin hilaparametrien välisestä erosta. Kyseinen hilaepäsopivuus saa aikaan, tyypillisesti koko ohutkalvon poikittain läpäiseviä, nauhamaisia dislokaatioketjuja. Hilaepäsopivuus venytää elastisesti YBCO:n yksikkökoppia substraatin hilarakenteen muotoiseksi. Suurilla YBCO:n ja substraatin välisten hilaparametrien eroilla YBCO:n on energeettisesti edullisempaa muodostaa levymäisiä *epäsopivuusdislokaatioita* (engl. misfit dislocations), joissa YBCO voi muodostaa tasomaisia *antifaasirajoja* (engl. antiphase boundary). Antifaasirajalla YBCO:n yksikkökopin  $ab$ -tason suuntaisten  $\text{CuO}_2$ -kerroksien välillä on  $c$ -akselin suuntainen korkeusero. Kyseinen rajapinta toimii  $c$ -akselin suuntaisena lukkiutumiskeskuksena. *Aukot* (engl. voids) ovat suuria näytteen sisään jääneitä tyhjiä kohtia. Syntyvien aukkojen koko ja määrä riippuu hyvin paljon kalvon kasvatusmenetelmästä [18].

### 2.2.2 Keinotekoiset lukkiutumiskeskukset

Keinotekoiset lukkiutumiskeskukset (engl. artificial pinning sites, APS) ovat suprajohteen hilarakenteeseen systemaattisesti tehtyjä kidevirheitä tai lisättyjä atomeja, molekyyliä ja niiden muodostamia rakenteita. APS:t ovat tyypillisesti luontaisia lukkiutumiskeskuksia suurempia ja lukitsevat vortekseja paljon voimakkaammin. APS:iin viitataan tästä syystä myös vahvoina lukkiutumiskeskusina. Yksittäinen APS voi jopa lukita samanaikaisesti useita eri vortekseja.

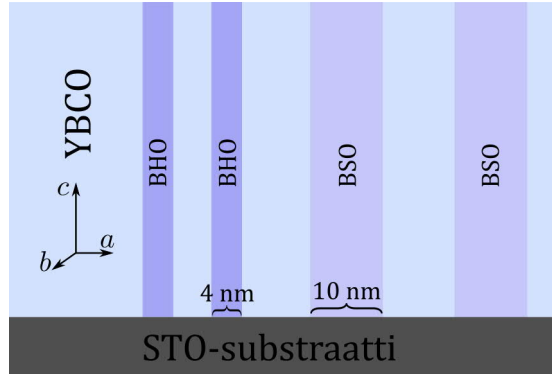
APS:t huonontavat luontaisten lukkiutumiskeskusten tavoin ympäröivän materiaalin rakenteellisia ja tätä kautta myös suprajohtavia ominaisuuksia [20]. Mahdollisuus muuttaa niiden tiheyttä, kokoa, muotoa ja asentoa suprajohtavan materiaalin hilassa tekevät niistä kuitenkin sovellusten kannalta suuren mielenkiinnon kohteen. APS:t mahdollistavatkin materiaalin suprajohtavien ja lukkiutumisominaisuuksien helpon optimoinnin eri sovelluksia varten.

Kriittinen tekijä tehokkaassa APS:ssa on sen materiaali. Korkean suhteellisen permeabiliteetin omaavat materiaalit lukitsevat vortekseja voimakkaimmin. Tämän lisäksi on huomioitava APS-partikkelin mahdollinen hilarakenne ja sen vuorovaikutus ympäröivän hilan kanssa [18]. Jotkin APS-materiaalit, kuten tässä tutkielmassa käsiteltävä BSO, voivat reagoida ympäröivän materiaalin hilan kanssa luoden ympärilleen lisää pienempiä lukkiutumiskeskuksia [21].

APS:n konsentraatiolla on myös suuri vaikutus materiaalin ominaisuuksiin. Luvussa 1.6.4 todettiin kriittisen virrantiheyden saavuttavan maksimiarvonsa tietyllä optimaalisella, lämpötilasta ja ulkoisesta kentästä riippuvalla, APS-konsentraatiolla. Sovelluskohteelle sopivaa dooppauskonsentraatiota valittaessa on siis huomioitava myös lämpötila sekä ulkoinen magneettikenttä, jossa suprajohteen on tarkoitus toimia.

APS:n lukitsemisenergia ja voimakkuus kasvavat sen koon funktiona yhtälön (72) osoittamalla tavalla. Toisaalta materiaalin suprajohtavat ominaisuudet heikkenivät





Kuva 9. BHO ja BSO lukkiutumiskeskusten kasvu YBCO:n hilarakenteeseen.

suprajohtavan materiaalin tilavuuden pienentyessä. Tavallisesti materiaalin kriittinen lämpötila ei kuitenkaan muutu muutamaa astetta enempää [20]. Optimaalinen APS:n leveys vaihtelee eri suprajohteiden välillä ja on viime kädessä verrannollinen kyseisessä materiaalissa esiintyvien vorteksien ytimien säteisiin. YBCO:n tapauksessa APS:n optimaalinen halkaisija on muutamien nanometrien luokkaa. Kyseistä kokoluokkaa olevia pistemäisiä lukkiutumiskeskuksia voidaan tuottaa useilla eri menetelmillä. Yksi vaihtoehto on tuottaa suprajohteeseen edellisessä luvussa käsiteltyjä luontaisia lukkiutumiskeskuksia muistuttavia pistemäisiä kidevirheitä säteilyttämällä sitä kevyillä hiukkasilla, kuten elektroneilla tai protoneilla. Painavimmilla ioneilla säteilyttäminen tuottaa puolestaan kuvan 9 kaltaisia kolumnaarisia lukkiutumiskeskuksia. Nanometriluokan lukkiutumiskeskuksia tuotetaan yleisesti kuitenkin lisäämällä epäpuhtausetomeja tai molekyyliä suprajohtavan materiaalin hilaan erilaisilla menetelmillä [18]. Esimerkiksi tässä tutkielmassa tutkittavat ohutkalvot valmistettiin pulssitetulla laserhöyrystysmenetelmällä, jossa BHO:lla ja BSO:lla doopattua suprajohdepellettiä höyrystettiin laserpulssien avulla  $\text{SrTiO}_3$ -substraatin (STO) pinnalle. BHO- ja BSO-partikkelit muodostivat prosessissa kuvassa 9 havainnollistettuja 4 ja 10 nm levyisiä kolumnaarisia lukkiutumiskeskuksia [22].

APS:n muodolla on myös suuri merkitys materiaalin lukkiutumisominaisuuksiin. Tyypillisesti APS:t ovat pistemäisiä tai edellä mainittuja kolumnaarisia rakentei-

ta. Tässä tutkielmassa mielenkiinnon kohteena olevien kolumnaaristen rakenteiden synnyn pulssitetussa laserhöyrystysmenetelmässä uskotaan olevan seurausta suprajohtavan materiaalin ja dopantin välisestä hilaepäsopivuudesta. Suurilla hilaepäsopivuuksien arvoilla dopantin on energeettisesti huomattavasti edullisempaa kiinnittyä aikaisemmin substraattiin kiinnittyneen dopanttimolekyylin päälle kuin venyttää hilaansa täsmäämään suprajohteen hilaparametreja [18].

Kolumnaariset lukkiutumiskeskukset lukitsevat vortekseja tehokkaimmin ulkoisen magneettikentän ollessa niiden suunnassa. Niiden tapauksessa puhutaankin ns. korreloidusta lukkiutumisesta, joka voidaan havaita korkeana piikkinä näytteen kriittisen virran mittauksessa ulkoisen kentän kulman funktiona [18].

### 3 Simulaatiomalli

Tässä tutkielmassa käytettiin molekyylidynamiikkasimulaatiota mallintamaan vorteksien lukkiutumisen kulmariippuvuutta edellisessä kappaleessa esitettyihin kolumnaariin lukkiutumiskeskuksiin. Simulaation yksityiskohtia käsitellään tarkemmin seuraavissa luvuissa.

#### 3.1 Molekyylidynamiikkasimulaatio

Molekyylidynamiikkasimulaatiossa (lyh. MD) tarkasteltava systeemi pilkotaan  $n$  määrään diskreetteihin, toistensa kanssa vuorovaikuttaviin osiin. Jokaiseen osaan  $n$  kohdistuvat voimat ajanhetkellä  $i$  lasketaan erikseen, jonka jälkeen niiden uudet nopeudet ja paikat lasketaan erilaisia algoritmeja käyttäen. Tässä tutkielmassa käytettävässä simulaatiossa hyödynnettiin Leapfrog-versiota tunnetusta Verlet'n algoritmista [8, 20].

Leapfrog-algoritmissa partikkelin  $n$  nopeus hetkellä  $t_{i+1/2}$  päivitetään ensin klas-

sisten liikeyhtälöiden mukaisesti kaavalla

$$\mathbf{v}_{i+1/2} = \mathbf{v}_{i-1/2} + \frac{\mathbf{F}_i}{m} \Delta t, \quad (73)$$

jossa aika-askel  $\Delta t = t_{i+1} - t_i$  voidaan valita käytettävissä olevaan laskentakoneistoon sopivaksi. Saatua tulosta käytetään hyväksi päivitettäessä partikkelin paikka hetkellä  $t_{i+1}$  kaavan

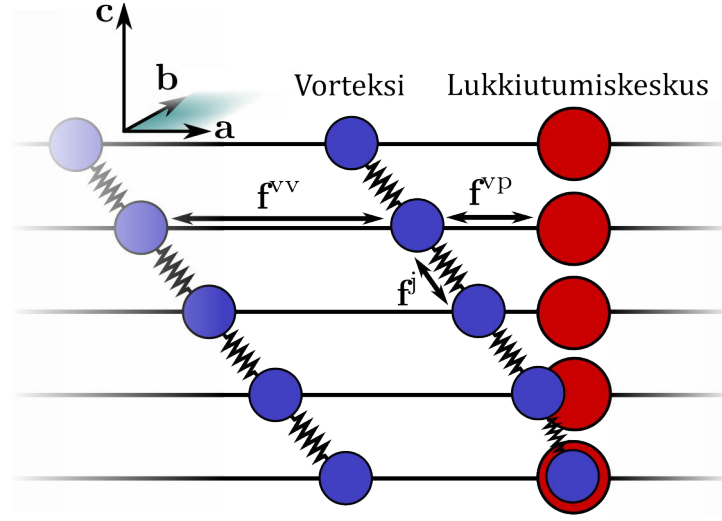
$$\mathbf{r}_{i+1} = \mathbf{r}_i + \mathbf{v}_{i+1/2} \Delta t \quad (74)$$

osoittamalla tavalla. Viimeiseksi lasketaan partikkeliin kohdistuvat voimat uudessa konfiguraatiossa ajanhetkellä  $t_{i+1}$ , jonka jälkeen iteraatiota toistetaan tarvittava määrä [20].

### 3.2 Käytetyn simulaatiomallin yksityiskohdat

Vorteksien lukkiutumisen kulmariippuvuuden tutkimiseen käytettiin viitteissä [8] ja [20] esitettyä MD-simulaatiota, jossa vortekseja ja kolumnaarisia lukkiutumiskeskuskuksia mallinnettiin partikkeliriveinä kuvan 10 havainnollistamalla tavalla. Vorteksien vierekkäisten partikkelien välillä vaikuttaa niitä kasassa pitävä luvussa 1.5.1 johdettu jännitysvoima, kun taas paikoillaan pysyvien YBCO:n *c*-hila-akselin suuntaisten kolumnaaristen lukkiutumiskeskusten partikkelien välillä ei vaikuta voimia. YBCO:n hilarakenteen ja vorteksien välinen vuorovaikutus on jätetty huomiotta.

Kolmiulotteisen simulaation laskennallista tehokkuutta on parannettu jakamalla se kaksiulotteisiin YBCO:n *ab*-hilatason suuntaisiin tasoihin. Yksittäisellä vorteksilla ja lukkiutumiskeskuskuksella on yksi sitä edustava partikkeli jokaisessa edellä mainitussa tasossa. Vortekseja edustavat partikkelit voivat liikkua ainoastaan niille määrättyssä tasossa ja vuorovaikuttaa ainoastaan muiden kyseisessä tasossa olevien partikkeleiden kanssa. Ainoa tasojen välinen vuorovaikutus on edellä mainittu vorteksien vierekkäisten partikkelien välinen jännitysvoima. Kerroksessa *i* olevaan



Kuva 10. Tarkasteltavan molekyyliidynamiikkasimulaation kerrosrakenteella mallinnetut vorteksit, kolumnaarinen lukkiutumiskeskus sekä niiden väliset voimat [8].

vorteksipartikkeliin  $n$  vaikuttava kokonaisvoima lasketaan kaavasta

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_{(i,n)}^{\text{tot}} = & \sum_{m \neq n} \mathbf{f}_{(i,n),(i,m)}^{\text{vv}} + \sum_k \mathbf{f}_{(i,n),(i,k)}^{\text{vp}} + \sum_{j=i \pm 1} \mathbf{f}_{(i,n),(j,n)}^{\text{j}} + \sum_{j=i \pm 1} \mathbf{f}_{(i,n),(j,n)}^{\text{mag}} \\ & + \mathbf{f}_{(i,n)}^{\text{L}} + \mathbf{f}_{(i,n)}^{\text{k}}, \end{aligned} \quad (75)$$

jossa vorteksien välinen repulsiovoima  $\mathbf{f}^{\text{vv}}$ , vorteksin ja lukkiutumiskeskuksen välinen attraktiovoima  $\mathbf{f}^{\text{vp}}$ , vorteksin itseensä kohdistama jännitysvoima  $\mathbf{f}^{\text{j}}$ , magneettikentän vorteksiin kohdistama voima  $\mathbf{f}^{\text{mag}}$ , siirtovirran vorteksiin kohdistama Lorentzin voima  $\mathbf{f}^{\text{L}}$  sekä vorteksin nopeuteen verrannollinen kitkavoima  $\mathbf{f}^{\text{k}}$  on esitelty aikaisemmin luvussa 1.5. YBCO ohutkalvoille ominainen geometria on toteutettu soveltamalla simulaatioon jaksollisia reunaehtoja  $ab$ -tasojen suunnassa ja äärellisiä reunaehtoja  $c$ -akselin suunnassa.

Simulaatio mahdollistaa ulkoisen magneettikentän  $B$  suuruuden ja suunnan varioimisen. Luvussa 1.5.4 johdettu ulkoisen magneettikentän vorteksiin kohdistama voima saa vorteksin orientoitumaan ulkoisen kentän suuntaiseksi luoden anisotrooppisen vaikutuksen. Vorteksien tiheys puolestaan määräytyy ulkoisen magneettiken-

tän voimakkuudesta kaavan

$$n = \frac{B}{\Phi_0} \quad (76)$$

mukaisesti, jossa  $\Phi_0$  on magneettivuon kvantti.

Käytetty MD-simulaatiomalli vaatii massan määrittämisen vorteksimpartikkeile. Massalla on oleellinen merkitys käytetyssä simulaatiomallissa, mutta se on huonosti määritelty suure todellisille vortekseille. Vorteksimpartikkelien massojen määrittelyyn on siis kiinnittettävä erityistä huomiota, jotta simulaatio vastaisi edes likimain vorteksien todellista dynamiikkaa. Vorteksimpartikkelien massana käytettiin lopulta arvoa  $m = 10^{-20}$  kg. Massan arvon vaihtelulla ei ole havaittu olevan suurta merkitystä simulaation tuloksiin. Tämä on seurausta siitä, että vorteksit saavuttavat maksiminopeutensa todella nopeasti, jolloin ne kulkevat lukkiutumiskeskusten välisen matkan likimain vakionopeudella. Klassisen dynamiikan mukaisesti vakionopeudella liikkuvan kappaleen massa on irrelevantti suure, mikä selittää simulaatiossa havaitun tuloksen. Edellä esitettyä argumenttia voidaan perustella vertaamalla liikkuvan vorteksin lukkiutumiskeskusten välillä kuluvaa matka-aikaa vorteksin ns. karakteristiseen aikaan  $\tau$ , jonka kuluessa levossa oleva vorteksi saavuttaa maksiminopeutensa. Karakteristinen aika voidaan laskea klassisen dynamiikan mukaisesti vorteksimpartikkelin massan ja luvussa 1.5.3 esitetyn kitkatermin suhteena

$$\tau = \frac{m}{\eta}. \quad (77)$$

Simulaatiossa vaikuttavan kitkatermin suuruus on  $\eta \approx 10^{-7}$  kg s<sup>-1</sup>, joten karakteristisen ajan voidaan em. arvoilla laskea olevan luokkaa  $\tau \approx 10^{-13}$  s. Vorteksien massasta riippumattoman maksiminopeuden on havaittu olevan korkeintaan luokkaa  $v_{\max} \approx 10^3$  m s<sup>-1</sup>. Lukkiutumiskeskusten väliset etäisyydet ovat puolestaan luokkaa  $s_{\text{ave}} \approx 10^{-7}$  m, jolloin vorteksien keskimääräinen matkustusaika niiden välillä on  $t_{\text{ave}} \approx s_{\text{ave}}/v_{\max} = 10^{-10}$  s. Saatu tulos on 1000 kertaa suurempi kuin edellä laskettu karakteristinen aika, joten rajatapauksessa  $\tau \ll t_{\text{ave}}$ , vorteksit todella

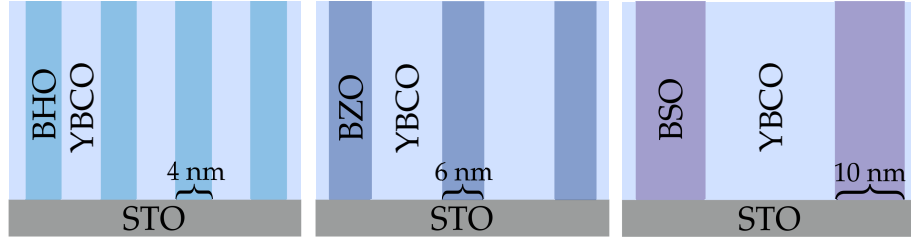
liikkuvat lukkiutumiskeskusten välisen matkan lähes kokonaan vakionopeudella ja vorteksimartikkelien massalla ei ole simulaation kannalta suurta merkitystä.

Simulaatio määrittää kriittisen virran arvon haarukointimenetelmällä, jonka iteraatioiden arvot määntyvät vorteksien stabiilisuuden mukaan. Vorteksien katsottiin olevan lukkiutuneen stabiilisti, mikäli niiden nopeus alitti ennalta määritetyn rajanopeuden arvon. Käytetty simulaatio ei ota huomioon lämpötilan vaikutusta vorteksien lukkiutumiseen, joten saadut tulokset pätevät vain matalille lämpötiloille.

Tässä kappaleessa käsitelty tasorakenteeseen perustuva simulaatiomalli soveltuu ainoastaan vorteksien dynamiikan mallintamiseen ulkoisen kentän kulmilla  $-60^\circ < \phi < 60^\circ$ , koska omiin  $ab$ -tason suuntaisiin kerroksiinsa sidotut vorteksimartikkelit eivät voi mitenkään kääntyä kyseisen tason suuntaiseksi. Suurilla kulmilla tasorakenteen ikään kuin vetää mallinnettavaa vorteksia  $c$ -akselin suuntaiseksi, mikä on täysin epäfysikaalinen tilanne. Lisäksi suuremmilla kulmilla eri tasoissa sijaitsevien vorteksimartikkelien väliset repulsiovoimat tulevat merkittäviksi, jota nykyinen simulaatio ei myöskään ota laskennallisista syistä johtuen huomioon [8, 20].

## 4 Tulokset

Tässä tutkielmassa analysoitiin BHO:lla, BZO:lla sekä BSO:lla doopattuja YBCO-ohutkalvoja. Jokaista dopanttia kohden oltiin valmistettu kolme eri ohutkalvoa vastaten 2-, 4- ja 6% dooppauskonsentraatioita. Kaikki ohutkalvot kasvatettiin STO-substraatille pulssitetulla laserhöyrystysmenetelmällä  $750\text{ }^\circ\text{C}$  lämpötilassa ampuen kohtioon 1500 laserpulsia  $1,3\text{ Jcm}^{-2}$  energiatheydellä. Virtamittauksia varten näytteet kuvioitiin märkäetsaus menetelmällä (engl. wet chemical etching), jolla saatiin aikaan  $50\text{ }\mu\text{m}$  levyisiä johtimia, joiden läpi virta johdettiin. Kaikki edellä mainitut dopantit muodostavat YBCO:n hilarakenteeseen kolumnaarisia lukkiutumiskeskus-  
sia, jotka poikkeavat toisistaan lähinnä halkaisijansa osalta. On tärkeää huomioida,



Kuva 11. Samalla dooppauskonsentraatiolla kasvatettujen BHO, BZO ja BSO lukkiutumiskeskusten kasvu YBCO:n hilaan.

että dooppauskonsentraatiosta puhuttaessa tarkoitetaan dopantin ja sen sisältämän materiaalin kokonaismassan suhdetta. Tästä seuraa, että kapeammat lukkiutumiskeskukset kasvavat keskimäärin tiheämpään konfiguraatioon leveämpiin lukkiutumiskeskukseen nähden kuvassa 11 havainnollistetulla tavalla. Tutkielman tarkoituksena on analysoida kolumnaaristen lukkiutumiskeskusten tiheyden ja halkaisijan vaikutusta magneettivuon lukkiutumiseen YBCO-ohutkalvoissa kokeellisten menetelmien sekä laskennallisten simulaatioiden avulla. Erityistä mielenkiintoa herättää ohutkalvojen läpi johdettavan kriittisen virran kulmariippuvuus, jota simuloitiin edellisessä luvussa esitetyn molekyyliidynamiikkasimulaation avulla.

## 4.1 Lukkiutumisvoima-analyysi

Näytteiden kriittiset lämpötilat ja magnetisaatiokäyrät mitattiin Quantum Design PPMS-mittalaitteella. Kalvojen magnetisaatiokäyrät mitattiin 10 K lämpötilassa ja 1 T YBCO:n  $c$ -akselin suuntaisessa ulkoisessa magneettikentässä ja niistä määritettiin Beanin mallin avulla vastaavat kriittiset virrantiheydet  $J_{c,10\text{ K}}$  [23]. Kriittisten virrantiheyksien avulla laskettiin puolestaan vorteksien lukkiutumisvoima kaavasta

$$F_{vp} = BJ_c(B). \quad (78)$$

Keskimääräinen maksimilukkiutumisvoima  $F_{vp,max}$  määritettiin esittämällä yllä olevan kaavan avulla lasketut lukkiutumisvoimat ulkoisen kentän funktiona ja sovitta-

malla pisteistöön muotoa

$$\frac{F_{vp}(B)}{F_{vp,max}} = \left(\frac{p}{q}\right)^q \left(\frac{B}{B_{max}}\right)^p \left(\frac{p+q}{p} - \frac{B}{B_{max}}\right)^q \quad (79)$$

oleva funktio, jossa  $p$  ja  $q$  ovat lukkiutumiskeskuksen kokoa ja muotoa kuvaavia parametreja ja jossa  $B_{max}$  vastaa ulkoista magneettikentää, jolla lukkiutumisvoima  $F_{vp}$  saavuttaa maksimiarvonsa [24]. Virrantiheyden kenttäriippuvuusdatasta määritettiin  $F_{vp,max}$ :n lisäksi ns. mukautumiskenttä  $B^*$  (engl. accommodation field). Mukautumiskenttä on määritelty vastaamaan ulkoisen kentän arvoa, jossa kriittisen virran arvo on pudonnut 90 % sen nollakentässä mitatusta arvosta. Kyseistä kenttää suuremmilla magneettikentän arvoilla vorteksien lukkiutumisen kollektiiviset vaikutukset tulevat merkittäviksi [25]. Eri näytteille mitatut kriittiset lämpötilat ja virrat sekä mukautumiskentät ja käyrien sovituksista saadut kokonaislukkiutumisvoimien arvot on esitetty taulukossa I. Kyseiset arvot on esitetty graafisesti kuvassa 12, jossa saman suureen arvot eri näytteille on esitetty suhteessa toisiinsa.

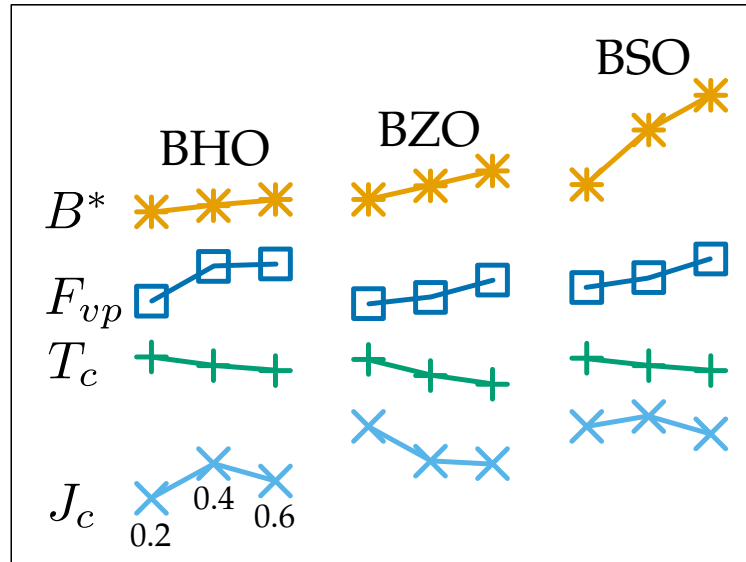
Taulukossa I esitetyistä kriittisistä lämpötiloista voidaan havaita dooppauksen heikentävä vaikutus materiaalin suprajohtaviin ominaisuuksiin. Kriittisen lämpötilan arvon lasku dooppauskonsentraation funktiona on selvästi voimakkainta BZO-doopatulla näytteellä, kun taas samalla konsentraatiolla BHO- ja BSO-doopattujen näytteiden kriittiset lämpötilat ovat 1–2 K korkeampia, ollen hyvin lähellä toisiaan. Tämä indikoi BZO:n nanopartikkeleiden häiritsevän YBCO:n hilarakennetta poikkeuksellisen paljon verattuna BHO:hon ja BSO:hon, luoden ympärilleen erilaisia kappaleessa 2.2.1 esitettyjä luontaisia lukkiutumiskeskuksia. Kyseinen ilmiö on havaittu aikaisemmin läpäisyelektronimikroskooppikuvissa (engl. Transmission Electron Microscopy, TEM), jossa YBCO:n hilarakenteen todettiin olevan vääristynyt ja sisältävän paljon epäsopivuusdislokaatioita 5 nm säteellä BZO-lukkiutumiskeskuksesta [26], kasvattaen sen efektiivistä halkaisijaa.

BHO- ja BSO-doopatuilla näytteillä kriittiset virrantiheydet saavuttavat maksimiarvonsa 4 % dooppausasteella. Tätä suuremmilla dooppauskonsentraatioilla doop-



Taulukko I. Eri dopanteilla ja konsentraatioilla doopattujen YBCO-ohutkalvojen kriittiset lämpötilat, kriittiset virrantiheydet 10 K lämpötilassa ja 1 T ulkoisessa magneettikentässä, mukautumiskentät sekä kokonaislukkiutumisvoimat.

Näyte	$T_c$ [K]	$J_{c,10\text{ K}}$ [MA/cm <sup>2</sup> ]	$B_{10\text{ K}}^*$ [mT]	$F_{vp,max}$ [GN/m <sup>3</sup> ]
ei-doopattu	89.8	10.1	50	189
BHO-2%	86.6	16.8	129	285
BHO-4%	85.4	24.2	160	590
BHO-6%	84.7	20.4	183	606
BZO-2%	86.2	32.2	185	520
BZO-4%	84.0	24.8	246	641
BZO-6%	82.7	24.1	309	932
BSO-2%	86.4	32.3	251	403
BSO-4%	85.4	34.6	488	484
BSO-6%	84.7	30.7	637	652

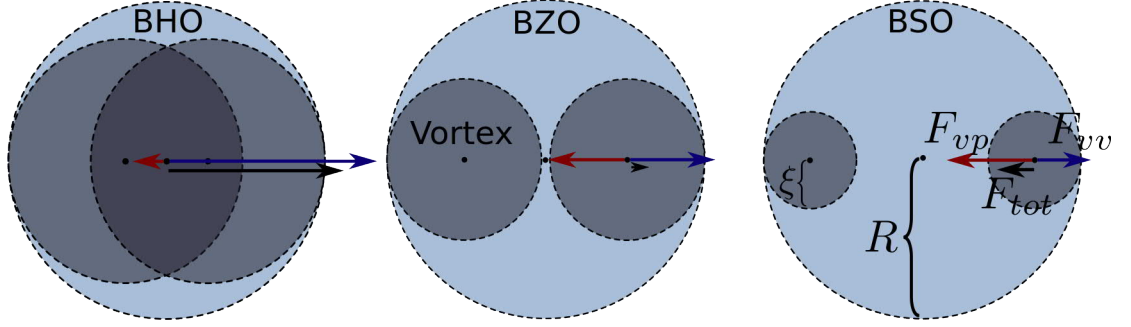


Kuva 12. Eri dopanttien konsentraation vaikutus kriittiseen virrantiheyteen, -lämpötilaan, kokonaislukkiutumisvoimaan sekä mukautumiskenttään. Saman suureen käyrät eri dopanteille ovat verrannollisia toisiinsa.

pauksen haitalliset vaikutukset materiaalin suprajohtaviin ominaisuuksiin tulevat suuremmiksi kuin vuon lukkiutumisesta aiheutuva hyöty. BZO-doopatulla näytteellä suurin kriittinen virrantiheys saavutetaan alhaisimmalla 2 % dooppauskonsentraatiolla, joka tukee edellä tehtyjä päätelmiä BZO-lukkiutumiskeskusten ympärille muodostuvista poikkeuksellisen voimakkaista luontaisista lukkiutumiskeskuksista.

Mukautumiskenttä kasvaa kaikilla näytteillä dooppauskonsentraation funktiona. Tämä voidaan selittää kvalitatiivisesti sillä, että suurempi lukkiutumiskeskusten määrä näytteessä yksinkertaisesti lukitsee enemmän vortekseja, joiden lukumäärä on suoraan verrannollinen ulkoisen magneettikentän suuruuteen. Tämä intuitiivisesti kasvattaa mukautumiskentän arvoa. Kasvu on poikkeuksellisen suurta BSO-doopatulla näytteellä, jossa yksittäinen halkaisijaltaan 10 nm oleva lukkiutumiskeskus kykenee teoriassa lukitsemaan samanaikaisesti kaksi vorteksiä. Teoriaa tukee BSO:lle määritetyt kokonaislukkiutumismoimien arvot, jotka ovat merkittävästi alhaisempia BHO- ja BZO-doopatuille näytteille määritettyihin arvoihin verrattuna BSO-lukkiutumiskeskuksen merkittävästi suuremmasta koosta huolimatta. Samaa BSO-lukkiutumiskeskukseen lukkiutuneet vorteksit kohdistavat toisiinsa merkittävän repulsiovoiman pienentäen lukkiutumiskeskuksen efektiivistä lukkiutumismoimaa, kasvattaen silti mukautumiskentän arvoa.

Kahden samaan BSO-lukkiutumiskeskukseen lukkiutuneen vorteksin teorian vahvistamiseksi laskettiin taulukossa II esitetyt eri lukkiutumiskeskusten vorteksiin kohdistamat attraktiiviset voimat  $F_{vp}$ , kahden lukkiutuneen vorteksin välinen repulsiovoima  $F_{vv}$ , sekä näiden erotuksena määritelty kokonaisvoima  $F_{tot}$ . Voimien laskut suoritettiin kappaleissa 1.5.2 ja 1.5.5 johdettujen kaavojen (32) ja (52) avulla kuvan 13 havainnollistamassa energeettisesti edullisimmassa konfiguraatiossa, jossa vorteksit maksimoivat etäisyytensä toisistaan niiden ytimien pysyessä lukkiutumiskeskuksen sisällä [27]. Kuvasta 24 nähdään, miten halkaisijaltaan 1,5 nm olevien vorteksin ytimet menevät suurelta osin päällekkäin niiden ollessa vain 4 nm levyisessä BHO-



Kuva 13. Vorteksin ja eri lukkiutumiskeskusten suhteellista kokoa havainnollistava kuva. BHO-, BZO- ja BSO-lukkiutumiskeskusten säteinä  $R$  on käytetty vastaavasti arvoja 2 nm, 3 nm sekä 5 nm. Vorteksin säteenä on puolestaan käytetty YBCO:n koherenssipituuden arvoa  $\xi = 1,5$  nm. Kyseisiä konfiguraatioita käytettiin laskemaan vorteksin väliset repulsiovoimat  $F_{vv}$ , vorteksin ja lukkiutumiskeskukseen välinen attraktiovoima  $F_{vp}$  sekä näiden erotuksena laskettu kokonaisvoima. Voimavektorien suhteellisia pituuksia on muutettu BHO:n tapauksessa havainnollisista syistä.

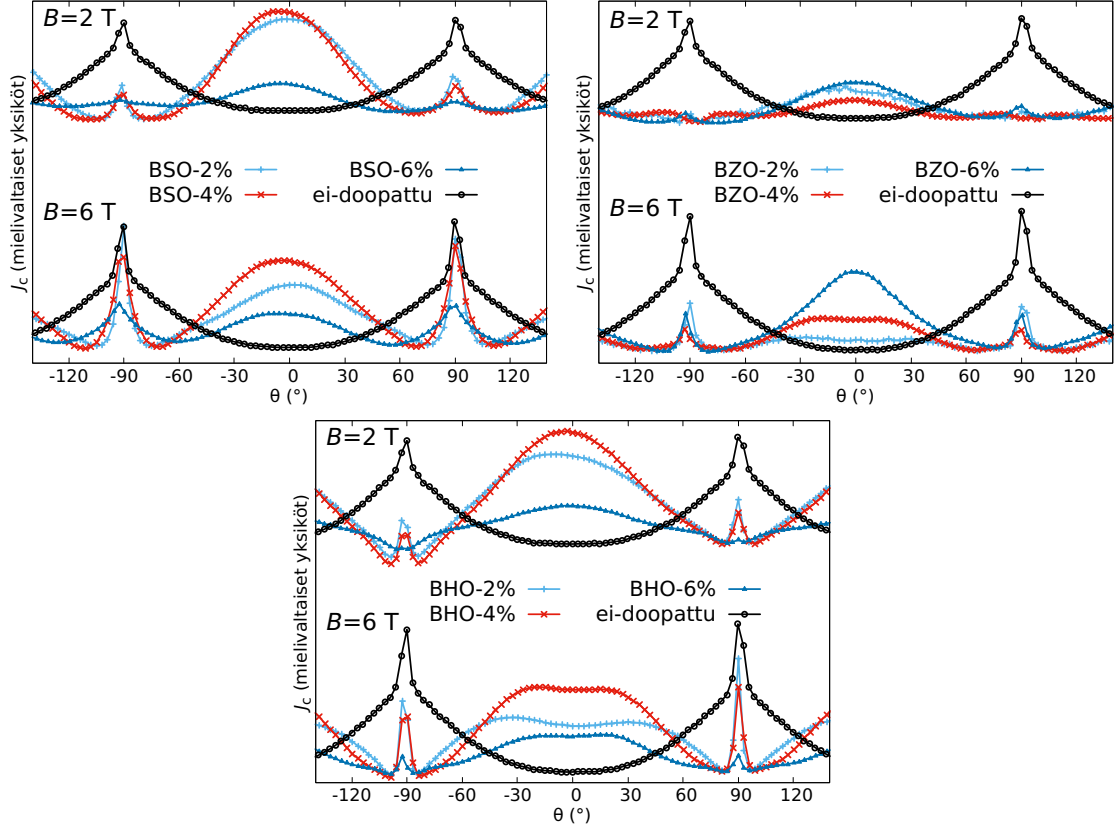
Taulukko II. Samassa lukkiutumiskeskuksessa sijaitsevien vorteksin väliset repulsiovoimat, vorteksin ja lukkiutumiskeskukseen väliset attraktiovoimat sekä näiden erotuksena määritetty kokonaisvoima. Kaikista edellä mainituista voimista puhuttaessa viitataan voimaan pituusyksikköä kohti.

Dopantti	$R$	$F_{vv}$	$F_{vp}$	$F_{tot}$
	(nm)	(mN/m <sup>2</sup> )	(mN/m <sup>2</sup> )	(mN/m <sup>2</sup> )
BHO	2	28	2	-26
BZO	3	9	8	-1
BSO	5	4	9	5

lukkiutumiskeskukseen. Taulukossa II esitetyistä voimien arvoista havaitaan, että BHO-lukkiutumiskeskustoissa kahden vorteksin väliset repulsiovoimat ovat paljon lukkiutumiskeskustoja ja vorteksin välistä lukkiutumisvoimaa suurempia. Tämä osoittaa, että kahden vorteksin lukkiutuminen samaan BHO-lukkiutumiskeskustoeseen on mahdotonta. Halkaisijaltaan 6 nm olevassa BZO-lukkiutumiskeskustoissa vorteksin ytimet ovat vierekkäin ja niiden välinen repulsiovoima on paljon alhaisempi BHO:n tapaukseen nähden. Kyseinen repulsiovoima on silti niukasti suurempi kuin attraktiivinen lukitsemisvoima, joten myöskään BZO-doopatussa näytteessä ei voida olettaa tapahtuvan useamman vorteksin lukkiutumista samaan lukkiutumiskeskustoeseen. BZO-lukkiutumiskeskustojen ympärille muodostuvat dislokaatiot mahdollisesti kasvattavat sen efektiivistä halkaisijaa, mikä voisi mahdollistaa useamman vorteksin samanaikaisen lukkiutumisen. Kyseisen efektiivisen lukkiutumisvoiman voidaan kuitenkin olettaa olevan hyvin heikko, eikä tästä näy merkkejä taulukossa I esitetyissä kokonaislukkiutumisvoimien arvoissa. BSO:n tapauksessa 10 nm levyisessä lukkiutumiskeskustoissa sijaitsevat vorteksit ovat tarpeeksi kaukana toisistaan, jotta attraktiivinen lukitsemisvoima on suurempi kuin vorteksin välinen repulsiovoima. Kahden vorteksin lukkiutuminen samaan lukkiutumiskeskustoeseen on siis mahdollista vain BSO-doopatun näytteen tapauksessa. Kyseinen ilmiö voidaan havaita vain hyvin pienillä kulmien arvoilla, sillä kaavan (53) ilmaisema lukkiutumisvoima pienenee nopeasti kulman  $\theta$  funktiona vorteksin välisen repulsiovoiman pysyessä likimain vakiona.

## 4.2 Kriittisen virrantiheyden kulmariippuvuus

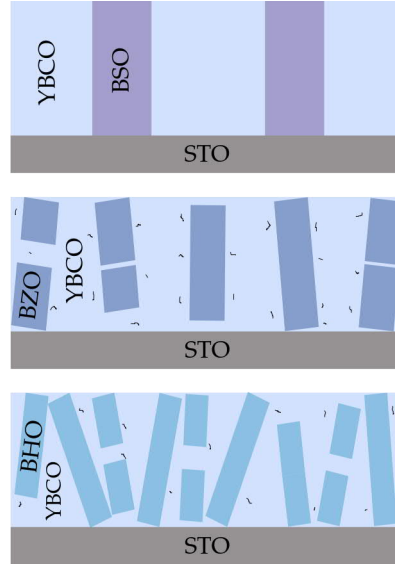
Kriittisen virrantiheyden kulmariippuvuus mitattiin 40 K lämpötilassa kulmavälillä  $0^\circ - 360^\circ$  käyttäen  $3^\circ$  askelta ulkoisen magneettikentän ollessa 0.5 T, 1 T, 2 T, 4 T, 6 T ja 8 T. Kuvassa 14 on esitetty eri näytteille mitatut 2 T ja 6 T kenttiä vastaavat kriittisen virran kulmariippuvuudet, jossa YBCO:n  $c$ -akselin suuntainen kenttä on



Kuva 14. Dooppaamattomalle sekä BHO- BZO- ja BSO-doopatuille näytteille mitatut kulmariippuvuudet 40 K lämpötilassa ulkoisen kentän ollessa 2 T ja 6 T.

määritelty vastaamaan nollakulmaa. Dooppaamattomalle näytteelle kriittinen virrantiheys on pienimmillään  $c$ -akselin suunnassa, kasvaen voimakkaasti ulkoisen kentän suunnan lähestyessä  $ab$ -tasoa. Tätä vastoin lähes kaikille doopatuille näytteille kriittinen virrantiheys saavuttaa maksimiarvonsa juuri  $c$ -akselin suunnassa. Tämä on selvä merkki siitä, että kaikki tarkasteltavat dopantit muodostavat YBCO:n hiilaan  $c$ -akselin suuntaisia kolumnaarisia lukkiutumiskeskuksia, jotka lukitsevat samansuuntaisesti orientoituneita vortekseja erityisen voimakkaasti.

BHO-doopatulla näytteellä  $c$ -akselin piikit ovat intensiteetiltään suurimpia dooppauskonsentraation ollessa 4%. Kyseisten piikkien intensiteetit ovat paljon pienempiä 6%-doopatussa näytteessä. Tämän lisäksi 6 T magneettikentässä havaitaan selvästi  $c$ -akselipiikkien kapenemista dooppauskonsentraation kasvaessa. Piikkien kape-



Kuva 15. Eri kolumnaaristen lukkiutumiskeskusten orientoituminen YBCO-ohutkalvossa.

neminen voidaan selittää BHO-lukkiutumiskeskusten  $c$ -akselin suuntaisella orientoitumisella, jolloin niiden kasvava lukumäärä intuitiivisesti parantaa vuon lukkiutumista kyseisessä suunnassa. Edellä mainitut havainnot piikkien intensiteeteistä selittyvät puolestaan edellisessä kappaleessa todetulla suprajohtavien ominaisuuksien heikkenemisellä dooppauskonsentraation kasvaessa. 6 T ulkoisessa magneettikentässä mitatussa näytteessä havaitaan ns. kaksijakoinen  $c$ -akselipiikki, jonka maksimit saavutetaan ulkoisen kentän kulman ollessa karkeasti  $\pm 30^\circ$ . Tätä pienemmillä kulmilla kriittinen virrantiheys pysyy lähes vakiona, kuitenkin pienentyen hitaasti nollakulmaa lähestyttäessä. Kyseisten piikkien voidaan todeta myös levenevän konsentraation kasvaessa. Tämä viittaa BHO:n muodostamien kolumnaaristen lukkiutumiskeskusten olevan mahdollisesti osittain katkenneita ja likimain homogeenisesti kallistuneita kulmavälille  $-30^\circ - 30^\circ$  YBCO:n  $c$ -akselin suhteen. Kyseinen ilmiö on havaittu aikaisemmin myös paljon tutkitulle BZO:lle [28–30], joten vain 2 nm pienemmästä halkaisijastaan johtuen näin voidaan olettaa tapahtuvan myös BHO-lukkiutumiskeskuksille.

BZO-doopatulla näytteellä havaittava selvästi isotrooppisin kriittisen virran kulmajakauma on seurausta edellä mainituista syistä. BZO-lukkiutumiskeskusten muodostuminen YBCO:n hilaan pulssitetussa laserhöyrystysmenetelmässä on osoitettu olevan vahvasti riippuvainen erityisesti kasvatuslämpötilasta ja kohtioon ammuttujen laserpulssien taajuudesta, vaikuttaen etenkin BZO-kolumnien kulmajakaumaan YBCO:n  $c$ -akselin suhteen [28]. Laajan kulmajakauman omaavien BZO-kolumnien on lisäksi havaittu kasvavan katkonaisesti kuvan 15 osoittamalla tavalla ja niiden ympärille on havaittu muodostuvan pistemäisinä lukkiutumiskeskuksina toimivia kidevirheitä [29, 30], joita voidaan odottaa olevan myös tässä työssä käytetyissä näytteissä. Erityisesti laajan kulma-alueen omaavien katkonaisten BZO-kolumnien läsnäolo sekä BZO:n YBCO:n hilaan indusoimat luontaiset lukkiutumiskeskukset selittäisivät BZO-doopatulle näytteelle mitattua isotrooppista kriittisen virran kulmajakaumaa. Merkittävä ero BHO- ja BZO-doopattujen näytteiden välillä on BZO:lla 6 T kentässä havaittava korkea  $c$ -akselipiikki, joka viittaa BZO-kolumnien olevan yhtenäisempiä ja vähemmän kallistuneita BHO-kolumneihin nähden. Tämä on intuitiivisesti järkevää BZO-lukkiutumiskeskusten suuremmasta halkaisijasta johtuen.

BSO-doopatuilla näytteillä havaitaan suhteellisen kapeat ja muihin näytteisiin verrattuna hyvin korkeat  $c$ -akselipiikit, mikä viittaa BSO-kolumnien kapeaan kulmajakaumaan. Tämä on odotettavaa BSO-kolumnien edellä käsiteltyihin dopantteihin verrattuna suuren halkaisijan johdosta. Korkeat  $c$ -akselipiikit tukevat myös edellisessä kappaleessa esitettyä teoriaa kahden vorteksin lukkiutumisesta samaan BSO-kolumniin. Kuvassa 15 on havainnollistettu edellä tehtyjä päätelmiä eri dopanttien muodostamien lukkiutumiskeskusten orientaatiosta.

### 4.3 Simulaatiotulokset

Kriittisen virratiheyden kulmariippuvuutta BHO- ja BSO-kolumneille simuloitiin kappaleessa 3 esitetyllä molekyyliidynamiikkasimulaatiolla. Taulukossa III on esitetty

Taulukko III. Simulaatioissa eri näytteillä käytetyt kolumnaaristen lukkiutumiskeskusten säteet  $R$ , lukumäärät  $N$ , pituudet  $h$ , simulaatiotason ala  $A$  sekä käytetty ulkoinen magneettikenttä.

Näyte	$R$ (nm)	$N$	$h$ (nm)	$A$ (nm <sup>2</sup> )	$B$ (T)
BHO-2%	2	16	20	200	0.75
BHO-4%	2	32	20	200	0.75
BHO-6%	2	48	20	200	0.75
BSO-2%	5	16	20	200	0.75
BSO-4%	5	32	20	200	0.75
BSO-6%	5	48	20	200	0.75

eri näytteiden simulaatiomalleissa käytettyjä parametreja. Simulaatioista saatavan statistiikan parantamiseksi jokaista näytettä kohden luotiin viisi sattumanvaraisesti generoitua lukkiutumiskeskuskonfiguraatiota, joille kaikille kriittisen virrantiheyden kulmariippuvuus laskettiin erikseen  $10^\circ$  askelta käyttäen välillä  $-60^\circ < \theta < 60^\circ$ . Kulmilla  $\pm\theta$  simuloiduista kriittisen virrantiheyden arvoista laskettiin keskiarvo ja keskihajonta. Simuloidun  $J_c(\theta)$ -käyrän voidaan olettaa olevan symmetrinen nollakulman suhteen, joten samoja kulmalle  $|\theta|$  laskettuja keskiarvoja ja -hajontoja käytettiin sekä kulmalle  $\theta$  että  $-\theta$ , mikä toteuttaa edellä mainitun symmetrian. BHO-lukkiutumiskeskusten todellisia tiheyksiä vastaavat simulaatioissa käytettyjen kolumnien lukumäärät on jaettu neljällä ja kyseisiä lukumääriä on käytetty myös vastaaville BSO-näytteiden simulaatioille laskenta-ajan pienentämiseksi. Käytettyyn simulaatioon ei ole implementoitu lämpötilan vaikutusta, joten simulaation avulla lasketut kriittiset virrantiheydet vastaavat teoriassa 0 K lämpötilassa tehtyjä mittauksia. Lämpötilalla ei kuitenkaan uskota olevan merkittävää vaikutusta simulaatiosta saataviin tuloksiin, joita verrattiin 40 K lämpötilassa suoritetuissa mittauksista saatuun dataan.



### 4.3.1 Kvantitatiivinen tarkastelu

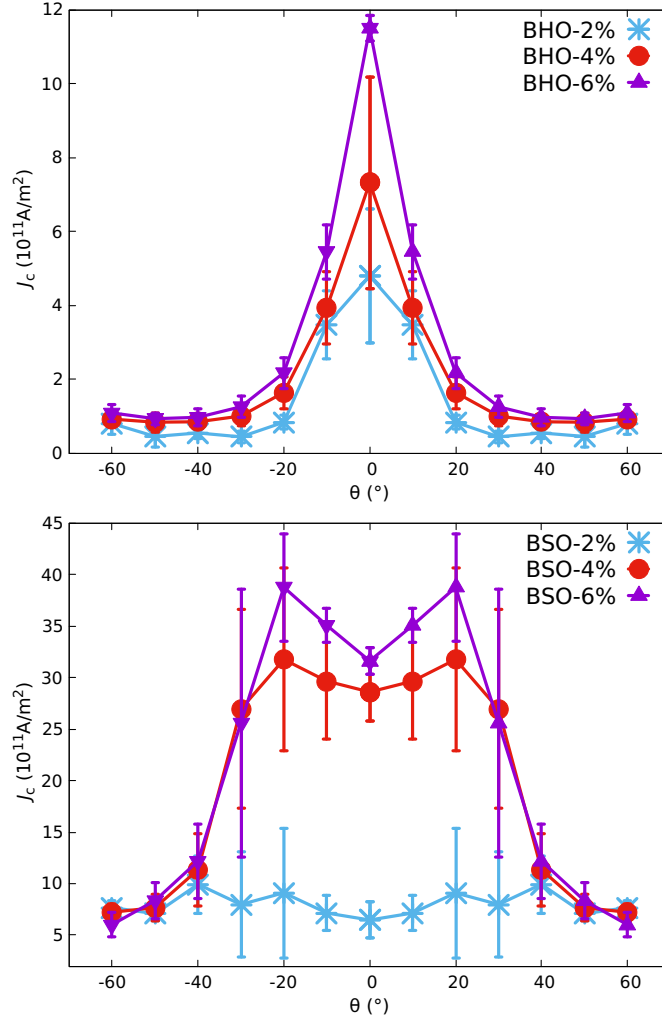
BHO- ja BSO-doopatuille näytteille simuloidut kriittisen virrantiheyden kulmariippuvuuskäyrät hajontoineen on esitetty kuvassa 16. Kuvasta havaitaan, että kriittinen virrantiheys kasvaa dooppauskonsentraation funktiona. Tämä on ristiriidassa kapaleessa 4.2 tehtyjen havaintojen kanssa, jossa suurin kriittinen virrantiheys saavutettiin 4%-dooppauskonsentraatioilla. Tämä aiheutuu siitä, että simulaatiomallissa ei ole otettu huomioon dooppauksen haitallista vaikutusta materiaalin suprajohtaviin ominaisuuksiin. Kriittisen virrantiheyden kasvu dooppauskonsentraation funktiona on täten varsin intuitiivinen tulos, jonka tarkempia mekanismeja tarkastellaan seuraavassa luvussa.

BHO-doopatun näytteen simulaatiossa havaitaan hyvin kapeita  $c$ -akselipiikkejä, jotka levenevät hieman dooppauskonsentraation pienentyessä. BHO-doopatun näytteen piikit ovat intensiteetiltään paljon pienempiä BSO-doopatun näytteen piikkeihin verrattuna. BSO-doopatulle näytteelle voidaan puolestaan havaita todella voimakkaita ja leveitä kaksoispiikkejä, joiden maksimit saavutetaan  $\pm 20^\circ$  kulmillla. Maksimien välissä kriittisen virran kulmariippuvuus on 2% - ja 4%-doopatuilla näytteillä hyvin isotrooppista, laskien kuitenkin lineaarisesti nollakulmaa lähestyttäessä. BSO-2%:lle simuloitu käyrä poikkeaa merkittävästi muista isotrooppisuutensa ja pienen intensiteettinsä johdosta.

Edellä tehdyt havainnot voidaan selittää yksinkertaisen kuvassa 17 esitetyn geometrisen mallin avulla. Merkitään havaittuja  $J_c(\theta)$ -käyrien maksimeja vastaavia kulmia  $\theta_{\max}$ :lla, ja oletetaan, että kyseinen kulma voidaan esittää kuvan 17 havainnollistamalla tavalla lukkiutumiskeskuksen säteen  $R$  ja ohutkalvon paksuuden  $h$  avulla muodossa

$$\theta_{\max} = \arctan \left( \frac{2R}{h} \right). \quad (80)$$

Kuvasta 17 nähdään, miten kyseisen kulman suuntaisesti orientoitunut vorteksi minimoi energiansa maksimoimalla lukkiutumiskeskuksen sisällä kulkeman etäisyyden-

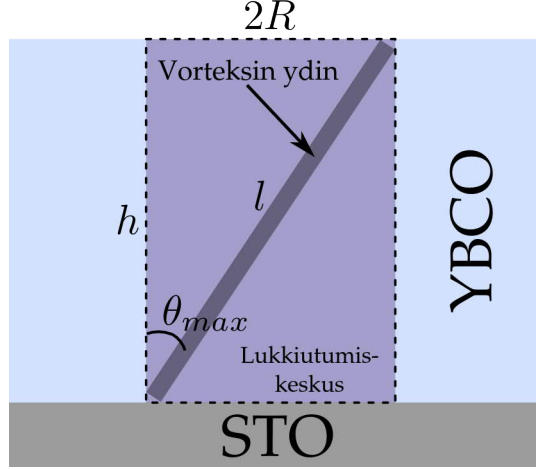


Kuva 16. BHO- ja BSO-doopatuille näytteille simuloidut kriittisen virrantiheyden kulmariippuvuuskäyrät.

sä kaavan

$$U = \frac{1}{2\mu_{\text{LK}}} \int_{V_{\text{LK}}} \mathbf{B}^2 dV + \frac{1}{2\mu_{\text{YBCO}}} \int_{V_{\text{YBCO}}} \mathbf{B}^2 dV \quad (81)$$

mukaisesti, jossa lukkiutumiskeskuksen suhteellinen permeabiliteetti  $\mu_{\text{LK}} \gg \mu_{\text{YBCO}}$ . Kyseisen kulman suuntaisesti orientoituneiden vorteksien voidaan siis olettaa lukkiutuvan voimakkaimmin lukkiutumiskeskuksiin, jolloin kyseisellä kulmalla voidaan olettaa myös esiintyvän kriittisen virrantiheyden maksimi. BHO- ja BSO-doopatuille



Kuva 17. Vorteksin ja lukkiutumiskeskuksen geometria.

näytteille luoduille simulaatioille kyseiset kulmat ovat

$$\theta_{\max}^{\text{BHO}} = \arctan\left(\frac{2 \cdot 2 \text{ nm}}{20 \text{ nm}}\right) \approx 11^\circ$$

$$\theta_{\max}^{\text{BSO}} = \arctan\left(\frac{2 \cdot 5 \text{ nm}}{20 \text{ nm}}\right) \approx 27^\circ.$$

Edellä laskettu kulma vastaa erittäin hyvin BSO-doopatululle näytteelle simuloidussa  $J_c(\theta)$ -käyrässä esiintyviä maksimeja. BHO-näytteelle simuloidussa käyrässä ei sen sijaan esiinny vain yksittäistä maksimia  $0^\circ$ -kulmassa, mikä on ristiriidassa yllä lasketun  $\theta_{\max}^{\text{BHO}}$ -arvon kanssa. Syynä tähän on mahdollisesti BHO-kolumnien pieni 4 nm halkaisija, jolloin leveydeltään noin 3 nm olevan vorteksin ytimen kulkema etäisyys kyseisessä kolumnissa on huonosti määriteltä. BSO-kolumnien halkaisija on puolestaan 10 nm, jolloin vorteksin kulkua kolumnin sisällä on helpompi mallintaa kuvassa 17 esitettynä suorana viivana. Kyseisessä kuvassa esitetty malli pätee siis vain kolumnaarisen lukkiutumiskeskusten halkaisijan ollessa paljon vorteksin halkaisijaa suurempi, kuten BSO-lukkiutumiskeskusten tapauksessa.

Ulkoisen magneettikentän kulman ollessa  $|\theta| < \theta_{\max}$ , voidaan vorteksin lukkiutumiskeskuksen sisällä kulkema etäisyys  $l$  kirjoittaa kuvan 17 havainnollistamalla

tavalla kulman  $\theta$  funktiona muodossa

$$l = \frac{h}{\cos \theta}, \quad (82)$$

jossa  $h$  on ohutkalvon paksuus. Kriittisen virrantiheyden voidaan olettaa olevan verrannollinen vorteksien kokemaan lukkiutumisvoimaan  $F_{\text{vp}}(\theta) = -\partial_{\theta}U$  [16]. Vorteksin magneettikenttään varastoituneen energian  $U$  voidaan puolestaan olettaa olevan suoraan verrannollinen etäisyyden  $l$  vastalukuun, jolloin kriittisen virrantiheyden kulmariippuvuudelle voidaan kirjoittaa verranto derivoimalla yhtälö (82) kulman  $\theta$  suhteen. Tässä tapauksessa käsitellään vain pieniä kulmia  $\theta < \theta_{\text{max}}$ , joten yhtälössä (82) esiintyvää kosini-termiä voidaan approksimoida sen Taylorin sarjakehitelmän  $\cos x = 1 - x^2/2! + x^4/4! - \dots$  kahden ensimmäisen termin avulla. Lukkiutumisvoiman kulmariippuvuudelle voidaan täten kirjoittaa verranto

$$J_c(\theta < \theta_{\text{max}}) \sim F_{\text{vp}}(\theta < \theta_{\text{max}}) \approx \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \frac{h}{1 + \frac{\theta^2}{2}} \right) = \frac{4h\theta}{(\theta^2 - 2)^2}. \quad (83)$$

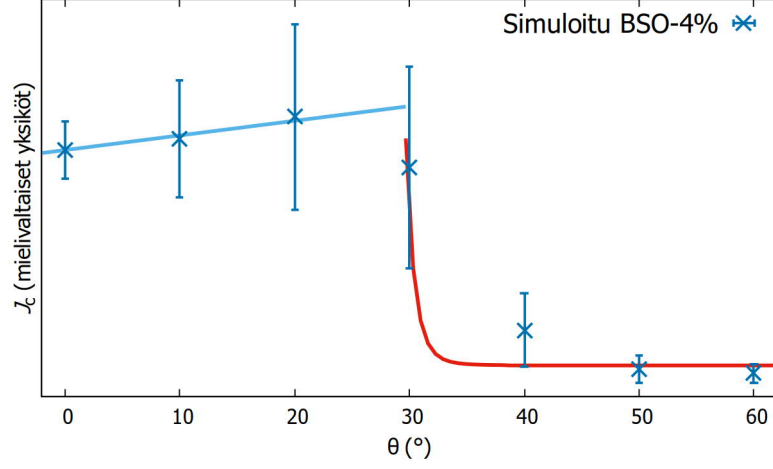
Yhtälöä (83) voidaan edelleen approksimoida sen sarjakehitelmän ensimmäisen termin avulla, jolloin kriittisen virrantiheyden ja kulman välille saadaan lineaarinen riippuvuus

$$J_c(\theta < \theta_{\text{max}}) \sim h\theta. \quad (84)$$

Kulmaa  $\theta_{\text{max}}$  suuremmilla kulmilla vorteksin lukkiutumiskeskuksen sisällä kulkea etäisyys  $l$  muuttuu kulman  $\theta$  funktiona kaavan

$$l = \frac{2R}{\sin \theta} \quad (85)$$

osoittamalla tavalla. Kriittisen virrantiheyden voidaan jälleen olettaa olevan verrannollinen vorteksien pituuden derivaattaan kulman  $\theta$  suhteen. Approksimoimalla yhtälössä (85) esiintyvää sini-funktiota sen Taylorin sarjakehitelmän  $\sin x \approx x - x^3/3! + x^5/5! - x^7/7! + \dots$  neljän ensimmäisen termin avulla, voidaan kriittisen



Kuva 18. Yhtälöiden (84) ja (86) sovitus BSO-4%-näytteelle simuloituun dataan. Sininen suora vastaa yhtälöä (84) ja punainen käyrä vastaa yhtälöä (86)

virran kulmariippuvuudelle kirjoittaa verranto

$$\begin{aligned}
 J_c(\theta > \theta_{\max}) \sim F_{vp}(\theta > \theta_{\max}) &= -\frac{\partial U(\theta)}{\partial \theta} \approx \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \frac{R}{\theta - \frac{\theta^3}{3!} + \frac{\theta^5}{5!} - \frac{\theta^7}{7!}} \right) \\
 &\sim -\frac{R(\theta^6 - 30 \cdot \theta^4 + 360 \cdot \theta^2 - 720)}{\theta^2 (\theta^6 - 42 \cdot \theta^4 + 840 \cdot \theta^2 - 5040)^2}. \quad (86)
 \end{aligned}$$

Yhtälö (86) ennustaa  $J_c(\theta)$ -käyrän laskevan nopeasti kulman  $\theta_{\max}$  läheisyydessä, jonka jälkeen se tasoittuu likimain vakioksi.

Kuvassa 18 on esitetetty edellä johdettujen yhtälöiden (84) ja (86) sovitus BSO-4%-näytteelle simuloituun dataan. Sovituksista nähdään edellä esitetyn teorian vastaavan hyvin tarkasti simuloituja tuloksia. Kulmavälillä  $0 < \theta < 30^\circ$  kriittisen virrantiheyden voidaan havaita kasvavan lineaarisesti yhtälön (84) ennustamalla tavalla, jonka jälkeen havaitaan yhtälön (83) ennustama  $J_c(\theta)$ :n äkillinen lasku ja tasoittuminen likimain vakioksi kulmilla  $\theta > 50^\circ$ . Yhteenvetona voidaan sanoa simuloitujen kriittisen virran kulmariippuvuuskyärien muodon aiheutuvan siitä, että edellä määriteltä maksimikulmaa  $\theta_{\max}$  suuremmilla kulmilla vorteksin tilavuus lukkiutumiskeskuksen sisällä pienenee voimakkaasti, mikä johtaa vorteksin energian kasvuun ja täten lukkiutumiskein voiman heikentymiseen. Sama ilmiö tapahtuu myös pienemmil-

lä kulmilla, joilla vorteksi sijaitsee kokonaan lukkiutumiskeskuksen sisällä. Tällöin lukkiutumiskeskuksen sisällä olevan vorteksin tilavuus on paljon pienempi edelliseen tapaukseen verrattuna. Tästä seuraa, että vorteksin energia lukkiutumiskeskuksen sisällä pysyy likimain vakiona, johtaen lukkiutumisvoiman ja kriittisen virrantiheyden lineaariseen kasvuun maksimikulmaa lähestyttäessä.

### 4.3.2 Kvalitatiivinen analyysi

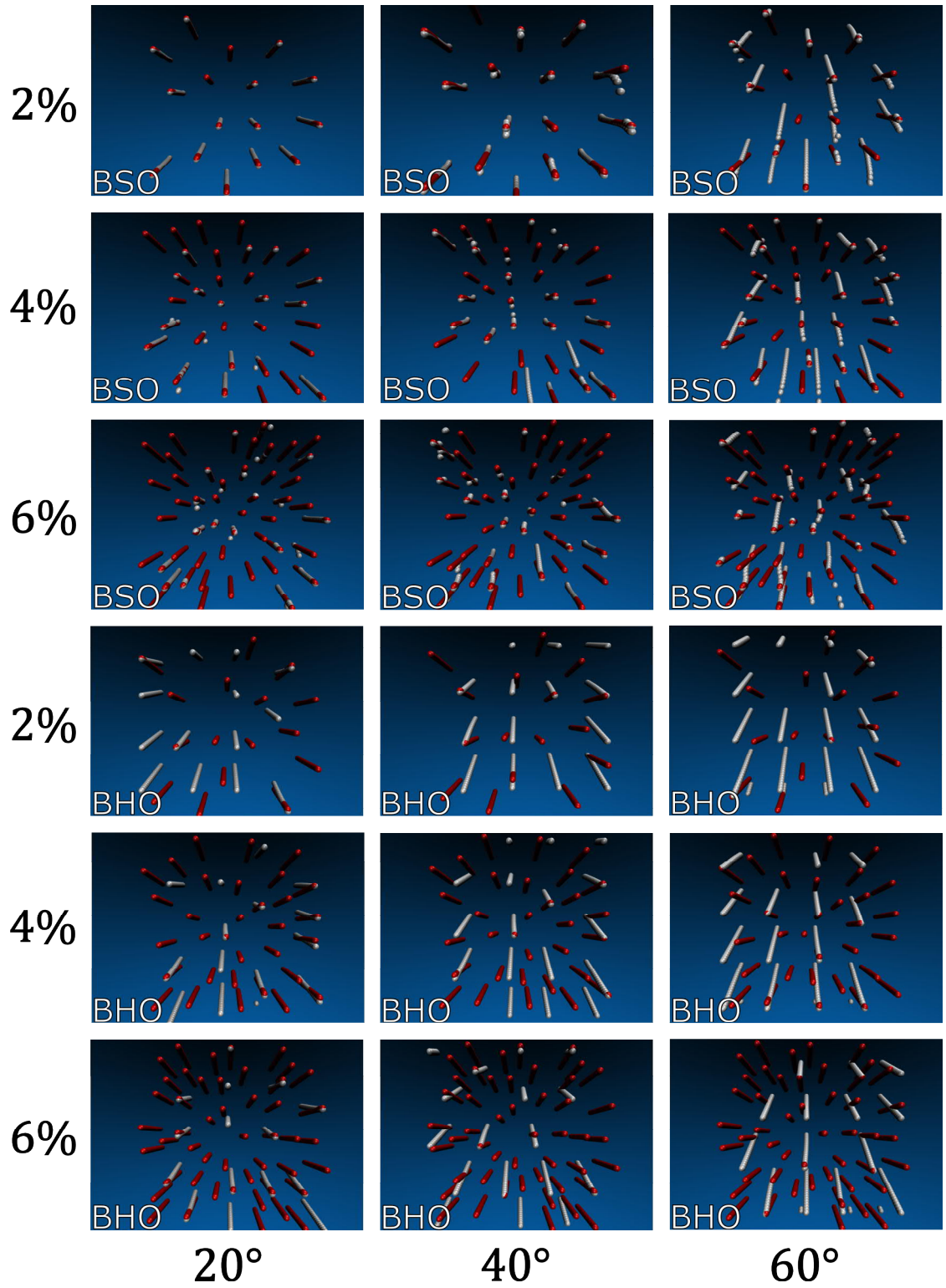
Kuvassa 19 on esitetty miten kulmiin  $20^\circ$ ,  $40^\circ$  ja  $60^\circ$  orientoituneet vorteksit lukkiutuvat eri dooppauskonsentraatioita vastaaviin BHO- ja BSO-kolumneihin. Kuvasta tulee ilmi samaa dooppausastetta vastaavien lukkiutumiskeskuskonfiguraatioiden virheellinen identtisyys BHO- ja BSO-näytteiden välillä, joka sallittiin simulaatioajan pienentämiseksi. Kuvasta havaitaan selvästi erot eri dooppauskonsentraatioiden välillä lukkiutumiskeskusten välisen etäisyyden pienenemisenä dooppausasteen kasvassa. 4%-dooppausastetta vastaavissa simulaatioissa vorteksin ja lukkiutumiskeskusten lukumäärät vastasivat toisiaan hyvin tarkasti. Suuremmilla dooppausasteilla lukkiutumiskeskuksia oli vortekseihin nähden huomattavasti enemmän, jolloin yksittäisten vorteksin oli helppo ajautua tyhjiin lukkiutumiskeskuksiin tai lukkiutua samanaikaisesti kahteen eri kolumniin, jonne ne pysähtyivät. Tämä selittää kriittisen virrantiheyden simuloitujen arvojen kasvun konsentraation funktiona.

Kuvassa 19 on havainnollistettu, miten BHO:lla doopatuille näytteille tehdyissä simulaatioissa yksittäinen vorteksi lukkiutuu korkeammilla konsentraatioillakin pääasiassa vain yksittäiseen lukkiutumiskeskukseen. Yksittäisten vorteksin havaittiin lipuvan lukkiutumiskeskuskonfiguraation läpi useita kertoja ennen pysähtymistään joko vapaaseen lukkiutumiskeskukseen tai niiden väliseen tilaan vorteksin välisen repulsiovoiman johdosta. Vorteksin muodon voidaan havaita pysyvän korkeilla kulmien arvoilla hyvin suorana, kun taas  $40^\circ$  pienemmillä kulmilla lukkiutuneiden vorteksin päät vääntyvät ulkoisen kentän suuntaiseksi poiketen niitä lukitsevan ko-

lumnin muodosta. Tämä on merkki BSO-kolumnien vortekseihin kohdistaman attraktiovoiman heikkoudesta ja lyhyestä kantamasta.

BSO-doopatuille näytteille tehdyissä simulaatioissa nähdään merkkejä BSO-kolumnien hyvin vahvasta lukitsemisvoimasta.  $40^\circ$  kulmassa olevien vorteksien samanaikaista lukkiutumista kahteen eri kolumniin voidaan havaita jo 2% dooppauskonsentraatiolla. Ilmiö vahvistuu suuremmilla kulmilla ja konsentraatioilla, joilla vorteksien muodon voidaan havaita myös taipuvan niitä lukitsevien kolumnien välillä. BSO-doopattujen näytteiden simulaatioissa ei havaita vorteksien pysähtymistä kolumnien väliseen tilaan vorteksien välisen repulsiovoiman johdosta, mikä osoittaa BSO-kolumnien voiman kantaman olevan merkittävästi BHO-kolumneja suurempi. BSO-kolumnien lukitsemisvoiman suuruus ilmenee myös pienillä kulmilla tehdyistä simulaatioista, joissa alunperin kulman  $\theta$  suuntaisesti orientoituneet vorteksit vääntyvät lähes täydellisesti niitä lukitsevien kolumnien suuntaisiksi.

Edellä tehdyt havainnot kolumnien lukitsemisvoiman kantamasta sekä yksittäisen vorteksin lukkiutumisesta kahteen eri kolumniin selittävät kvalitatiivisesti, miksi BSO-doopatuille näytteille simuloitujen kriittisten virrantiheyksien arvot ovat paljon suurempia BHO-simulaatioihin verrattuina. Erityistä mielenkiintoa herättää kuvassa 16 esitetyn 2% konsentraatiolla BSO-doopatulle näytteelle simuloitu kulma-riippuvuuskäyrä, joka poikkeaa intensiteettinsä ja isotrooppisuutensa osalta merkittävästi muilla dooppauskonsentraatioilla havaituista käyristä. Tästä voidaan tehdä johtopäätös, että suurien lukkiutumiskeskuksien tapauksessa dooppauskonsentraation kasvattamisella tietyllä välillä on merkittävä vaikutus kriittisen virrantiheyden arvoon. BSO-2%-näytteelle simuloidun  $c$ -akselipiikin matala intensiteetti selittyy BSO-kolumnien vortekseihin kohdistaman vahvan lukitsemisvoiman suuren kantaman avulla. 2% dooppauskonsentraatiota vastaavassa simulaatiossa BSO-kolumnit ovat vielä sen verran kaukana toisistaan, että yksittäiset vorteksit pystyvät virumaan lukkiutumiskeskuskonfiguraation läpi ja lukkiutumaan epästabiliisti kolumnien väli-



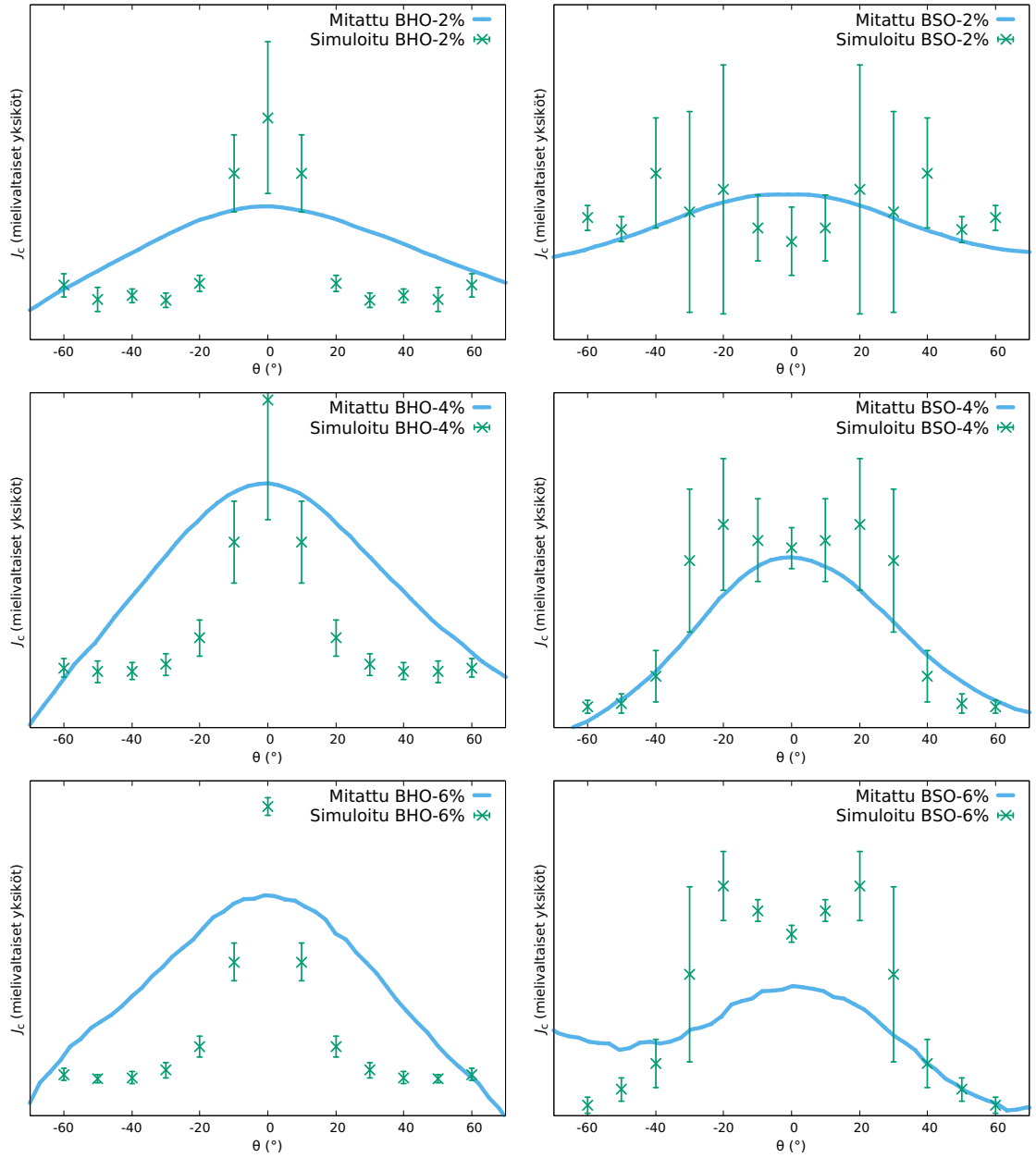
Kuva 19. Eri kulmiin orientoituneiden vorteksin lukkiutuminen eri dooppauskon-  
sentraatioita edustavilla BHO -ja BSO- lukkiutumiskeskuskonfiguraatioilla.



seen tilaan. 4% konsentraatiolla BSO-kolumnien välinen keskimääräinen etäisyys on kutistunut jo niin pieneksi, että vorteksit kokevat kaikkialla BSO-kolumnien merkittävän attraktiivisen lukitsemisvoiman. BHO-kolumnien tapauksessa kolumnien välisessä tilassa vaikuttava lukitsemisvoima olisi edelleen suhteellisen heikko, jolloin dooppauskonsentraation kasvattamisella 2–4%:iin ei ole niin suurta vaikutusta kriittiseen virrantiheyteen kuin BSO:lla doopatun näytteen tapauksessa. BSO-2%-näytteelle simuloidun kulmariippuvuuskäyrän isotrooppisuus voidaan puolestaan selittää edellä todetulla kahden vorteksin lukkiutumisella samaan lukkiutumiskeskukseen vorteksin ja  $c$ -akselin välisen kulman ollessa tarpeeksi suuri. Pienillä kulmilla vorteksit lukkiutuvat voimakkaasti yksittäisiin lukkiutumiskeskuksiin, kun taas suurilla kulmilla lukkiutuminen yksittäiseen kolumniin on heikompaa, mutta vorteksin mahdollisuus lukkiutua samanaikaisesti useampaan kolumniin kasvattaa kokonaislukkiutumisvoimaa. Täten kriittinen virrantiheys voidaan olettaa likimain vakioksi kulman  $\theta$  funktiona matalilla konsentraatioilla doopatuilla näytteillä. Kokeellisesti todettua kahden vorteksin lukkiutumista samaan BSO-kolumniin ei havaittu simulaatioissa.

#### 4.4 Simulaatioiden ja kokeellisten tulosten vastaavuus

Kuvassa 20 on esitetty eri näytteille 1 T ulkoisessa magneettikentässä ja 40 K lämpötilassa mitatut kriittisen virrantiheyden kulmariippuvuuskäyrät sekä niitä vastaavat simuloidut kulmariippuvuuskäyrät, jotka on aikaisemmin esitetty myös kuvassa 16. Mitattuja ja simuloituja kulmariippuvuuskäyriä verrattaessa on huomioitava käytetyn simulaation olevan hyvin yksinkertaistettu ja idealisoitu malli vorteksien todelliseen dynamiikkaan verrattuna. Käytetty simulaatio ei ota lainkaan huomioon todellisuudessa mahdollisesti ilmeneviä kolumnien kallistumia, katkonaisuuksia tai muita YBCO:ssa ilmeneviä kidevirheitä, joilla kaikilla voidaan olettaa olevan suuri vaikutus näytteen kriittisen virran kulmariippuvuuteen. Tästä huolimatta mitattuja



Kuva 20. Simuloidut ja kokeellisesti mitatut kriittisen virrantiheyden kulmariippuvuuskäyrät. Kokeelliset mittaukset on suoritettu 1 T ulkoisessa magneetikentässä ja 40 K lämpötilassa. BHO-6%, BSO-4% sekä BSO-6% näytteille mitatut kulmariippuvuuskäyrät on skaalattu vastaamaan paremmin simuloituja tuloksia.

ja simuloituja kulmariippuvuuskäyriä vertaamalla voidaan tehdä tiettyjä johtopäätöksiä.

BHO-doopatuille näytteille simuloidut  $c$ -akselipiikit ovat paljon kapeampia kokeellisesti mitattuihin piikkeihin nähden kaikilla dooppauskonsentraatioilla. Täs-

tä voidaan päätellä, että BHO-kolumnien on oltava merkittävästi kallistuneita  $c$ -akseliin nähden kappaleessa 4.2 tehtyjen päätelmien mukaisesti. Muussa tapauksessa havaittaisiin mitä todennäköisimmin simulaatioiden ennustama terävä  $c$ -akselipiikki. Tämän lisäksi mitattua piikkiä saattaa leventää BHO-kolumnien mahdollinen katkonaisuus ja pistemäisinä lukkiutumiskeskuksina toimivien kidevirheiden muodostuminen BHO-kolumnien ympärille, mitä on havaittu tapahtuvan BZO-doopatuille näytteille [28, 30, 31].

BSO-doopatuille näytteille mitattujen piikkien leveydet vastaavat suhteellisen hyvin simuloituja tuloksia. Tämän avulla voidaan toistaa aikaisemmin kappaleessa 4.2 tehty päätelmä BSO-kolumnien vahvasta  $c$ -akselin suuntaisesta orientaatiosta. BSO-2%-näytteelle mitattu suhteellisen isotrooppinen kulmajakauma on myös sopuinnussa simulaatioiden kanssa. Kappaleessa 4.3.2 tehty kvalitatiivinen analyysi vorteksien lukkiutumisen mekaniikasta kuvaa siis jossain määrin vorteksien todellista lukkiutumista. 2% dooppauskonsentraatiolla BSO-kolumnien välinen etäisyys on sen verran suuri, että yksittäiset vorteksit pystyvät helposti virumaan lukkiutumiskeskuskonfiguraation läpi ja lukkiutumaan heikosti kolumnien väliseen tilaan, jolloin  $c$ -akselin suunnassa saavutettava kriittinen virrantiheys on suhteellisen matala. Suurilla kulmilla yksittäiset vorteksit voivat puolestaan lukkiutua samanaikaisesti useampiin kolumneihin, mikä kasvattaa kyseisillä kulmilla saavutettavien kriittisten virtojen arvoja johtaen hyvin isotrooppiseen kulmajakaumaan nimenomaan pienillä dooppauskonsentraatioilla. BSO-näytteille mitatuissa kulmariippuvuuskäyrissä ei ole nähtävissä simulaatioissa ilmeneviä kaksoispiikkejä. Kappaleessa 4.3.1 esitetty geometrinen malli vorteksien lukkiutumisesta ei siis kuvaa vorteksien lukkiutumista todellisuudessa, jossa vorteksi kulkee lukkiutumiskeskuksen läpi monimutkaisempaa reittiä.

## 5 Johtopäätökset

Kriittisen virrantiheyden kulmariippuvuuden kokeellisia mittauksia ja laskennallisia simulaatioita vertaamalla voidaan tehdä päätelmiä BHO- ja BSO-kolumnien kasvusta YBCO:n hilaan ja niiden vaikutuksesta kriittiseen virrantiheyteen. BHO-doopatussa näytteessä esiintyvät kolumnit eivät kasva suoraan YBCO:n  $c$ -akselin suuntaisesti, vaan ovat kallistuneet likimain homogeenisesti suuremmalle kulma-alueelle aiheuttaen suhteellisen matalan ja leveän  $c$ -akselipiikin. Tämän lisäksi BHO-kolumneissa saattaa esiintyä katkonaisuutta ja ne saattavat aiheuttaa kidevirheitä niitä ympäröivään YBCO:n hilarakenteeseen, mutta tästä ei ole saatu varsinaista näyttöä. BSO-doopatussa näytteessä esiintyvät kolumnit kasvavat puolestaan hyvin pitkälti YBCO:n  $c$ -akselin suuntaisesti, johtaen korkeisiin  $c$ -akselipiikkeihin. Kyseiset kolumnit lukitsevat vortekseja paljon BHO-kolumneja voimakkaammin, minkä takia BSO-doopatulla näytteellä havaitaan suurempia kriittisiä virrantiheyksiä. Suuremmilla kulmilla havaitaan yksittäisen vorteksin lukkiutumista useampiin eri lukkiutumiskeskukseen, mikä kasvattaa kriittistä virrantiheyttä entisestään vastaavilla kulmilla. Simulaatioissa ei havaittu BSO-doopatuille näytteille kokeellisesti todettua kahden vorteksin lukkiutumista samaan lukkiutumiskeskukseen.

Tutkielman projektia voi kehittää tulevaisuudessa luomalla lukkiutumiskeskuskonfiguraatioon katkonaisia ja kallistuneita kolumneja sekä pistemäisiä YBCO:n kidevirheitä edustavia lukkiutumiskeskkuksia. Vertaamalla edellä mainittuja ominaisuuksia sisältävien lukkiutumiskeskuskonfiguraatioiden avulla simuloituja kriittisen virrantiheyden kulmariippuvuuskäyriä kokeellisista mittauksista saatuun dataan, voidaan tehdä paljon enemmän johtopäätöksiä näytteissä esiintyvien lukkiutumiskeskusten luonteesta sekä niiden vaikutuksesta vorteksin lukkiutumisen dynamiikkaan. Tässä työssä käytettyä kaksikulotteista molekyyliidynamiikkasimulaatiota voi myös laajentaa kolmeen ulottuvuuteen, jolloin saadaan tietoa myös vähän tutkitusta  $ab$ -tason suuntaisesta lukkiutumisesta. Simulaatioon pystytään implementoimaan

myös lämpötilan vaikutus ns. Langevin termostaatin avulla [32].

## Viitteet

- [1] C. P. Poole Jr., H. A. Farach, R. J. Creswick ja R. Prozorov, *Superconductivity, Second Edition* (Academic Press, 2007).
- [2] J. Bardeen, L. N. Cooper ja J. R. Schrieffer, Physical Review **108**, 1175 (1957).
- [3] D. Schroeder, *An Introduction to Thermal Physics* (Robin J. Heyden, 2000).
- [4] B. Rosenstein ja D. Li, Rev. Mod. Phys. **82**, 109 (2010).
- [5] T. P. Orlando ja K. A. Delin, *Foundations of Applied Superconductivity* (Addison-Wesley, 1991).
- [6] M. Roseman ja P. Grütter, J. Appl. Phys. **91**, 10 (2002).
- [7] G. Blatter, M. V. Feigel'man, V. B. Geshkenbein, A. I. Larkin ja V. M. Vinokur, Reviews of Modern Physics **66**, 1125 (1994).
- [8] P. Paturi, M. Malmivirta, T. Hynninen ja H. Huhtinen, J. Phys. Cond. Mat. **30**, 315902:1 (2018).
- [9] M. Tinkham, *Introduction to Superconductivity* (McGraw-Hill, In., 1996).
- [10] J. Bardeen ja M. J. Stephen, Phys. Rev. **140**, A1197 (1965).
- [11] J. R. Clem, J. Low Temp. Phys. **18**, 427 (1975).
- [12] F. C. Klaassen, G. Doornbos, J. M. Huijbregtse, R. C. F. van der Geest, B. Dam ja R. Griessen, Phys. Rev. B **64**, 184523 (2001).
- [13] A. Rahman, Z. Rahaman ja N. Samsudoha, American Journal of Physics and Applications **3**, 39 (2015).
- [14] T. Matsushita, *Flux pinning in superconductors* (Springer, Heidelberg, Germany, 2007).

- [15] I. Langmuir, J. Am. Chem. Soc. **38**, 2221 (1916).
- [16] V. Pan, Y. Cherpak, V. Komashko, S. Pozigun ja C. Tretiatchenko, Phys. Rev. B **73**, 054508 (2006).
- [17] D. Song, S. Ishida, A. Iyo, M. Nakajima, J. Shimoyama, M. Eisterer ja H. Eisaki, Scientific Reports **6**, 26671 (2016).
- [18] S. R. Foltyn, L. Civale, J. L. MacManus-Driscoll, Q. X. Jia, B. Maiorov, H. Wang ja M. Maley, Nature Materials **6**, 631 (2007).
- [19] U. Welp, W. K. Kwok, G. W. Crabtree, K. G. Vandervoort ja J. Z. Liu, Phys. Rev. Lett. **62**, 1908 (1989).
- [20] M. Malmivirta, *The Role of Dopant Morphology in Superconducting  $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$  Thin Films* (Turun Yliopisto, 2017).
- [21] C. V. Varanasi, P. N. Barnes, J. Burke, L. Brunke, I. Maartense, T. J. Haugan, E. A. Stinzianni, K. A. Dunn ja P. Haldar, Supercond. Sci. Technol. **19**, L37 (2006).
- [22] J. J. Shi ja J. Z. Wu, J. Appl. Phys. **118**, 164301:1 (2015).
- [23] H. P. Wiesinger, F. M. Sauerzopf ja H. W. Weber, Physica C **203**, 121 (1992).
- [24] P. Paturi, M. Malmivirta, H. Palonen ja H. Huhtinen, IEEE T. Appl. Supercond. **26**, 8000705:1 (2016).
- [25] P. Paturi, M. Irjala, A. B. Abrahamsen ja H. Huhtinen, IEEE T. Appl. Supercond. **19**, 3431 (2009).
- [26] M. Peurla, H. Huhtinen, Y. Y. Tse, J. Raittila ja P. Paturi, IEEE T. Appl. Supercond. **17**, 3608 (2007).
- [27] C. Reichhardt ja N. Groenbech-Jensen, Phys. Rev. Lett. **85**, 2372 (2000).

- [28] B. Maierov, S. A. Baily, H. Zhou, O. Ugurlu, J. A. Kennison, P. C. Dowden, T. G. Holesinger, S. R. Foltyn ja L. Civale, *Nat. Mater.* **8**, 398 (2009).
- [29] F. J. Baca, T. J. Haugan, P. N. Barnes, T. G. Holesinger, B. Maierov, R. Lu, X. Wang, J. N. Reichart ja J. Z. Wu, *Adv. Funct. Mater.* **23**, 4826 (2013).
- [30] M. Malmivirta, L. Yao, H. Huhtinen, H. Palonen, S. van Dijken ja P. Paturi, *Thin Solid Films* **562**, 554 (2014).
- [31] F. J. Baca, P. N. Barnes, R. L. S. Emergo, T. J. Haugan, J. N. Reichart ja J. Z. Wu, *Appl. Phys. Lett.* **94**, 102512 (2009).
- [32] T. Schlick, *Molecular Modeling and Simulation: An Interdisciplinary Guide, Second Edition* (Springer-Verlag New York, 2010).
- [33] V. L. Ginzburg ja L. D. Landau, *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **20**, 1064 (1950).
- [34] I. Askerzade, *Physica C* **390**, 281 (2003).
- [35] M. R. Spiegel, S. Lipschutz ja J. Liu, *Schaum's Outline of Mathematical Handbook of Formulas and Tables, Fourth Edition* (McGraw-Hill, 2013).
- [36] S. Brunauer, P. H. Emmett ja E. Teller, *Journal of the American Chemical Society* **60**, 309 (1938).
- [37] B. Schumacher ja M. Westmoreland, *Quantum Processes, Systems, and Information* (Cambridge University Press, 2010).
- [38] G. B. Arfken ja H. J. Weber, *Mathematical Methods for Physicists, Sixth Edition* (Academic Press, 2005).



## A Ginzburg-Landau-yhtälöt

Ginzburg-Landau-teorian perustana on oletus, että lähellä transitiolämpötilaa  $T_c$  oleva Gibbsin vapaan energian tiheys voidaan kirjoittaa muodossa

$$G(\phi) = G_n + \frac{1}{V} \int \left[ \frac{1}{2m} (-i\hbar\nabla + e\mathbf{A})\phi^* (i\hbar\nabla + e\mathbf{A})\phi + \frac{\mathbf{B}^2(\mathbf{r})}{2\mu_0} - \mu_0\mathbf{H}(\mathbf{r})\mathbf{M}(\mathbf{r}) + a\phi\phi^* + \frac{1}{2}b\phi\phi^*\phi\phi^* + \dots \right] dV, \quad (87)$$

jossa  $\phi$  on kompleksinen järjestysparametri sekä  $a$  ja  $b$  siitä riippumattomia parametreja. Gibbsin vapaa energia minimoituu NTP-ensemblen termodynaamisessa tasapainotilassa [3], joten sen derivaatta  $\phi^*$ :n ja  $\mathbf{A}$ :n suhteen häviää. Varioimalla yhtälö (87) vaiheparametrin  $\phi$  suhteen saadaan

$$\frac{\partial G(\phi)}{\partial \phi^*} = \frac{1}{2m} (i\hbar\nabla + e\mathbf{A})^2 \phi + a\phi + b|\phi|^2 \phi = 0. \quad (88)$$

Olettamalla, että  $\nabla \cdot \mathbf{A} = \mathbf{A} \cdot \nabla$ , yhtälö (88) voidaan esittää myös muodossa

$$\frac{1}{2m} (\hbar^2 \nabla^2 - 2i\hbar e \mathbf{A} \cdot \nabla - e^2 \mathbf{A}^2) \phi - a\phi - b|\phi|^2 \phi = 0. \quad (89)$$

Yhtälö (89) on ensimmäinen kahdesta Ginzburg-Landau-yhtälöstä. Toinen GL-yhtälö saadaan varioimalla yhtälöä (87) vektoripotentiaalin  $\mathbf{A}$  suhteen. Tässä täytyy ottaa huomioon, että magneettikenttä  $\mathbf{B}$  riippuu vektoripotentiaalista määritelmän  $\mathbf{B} = (\nabla \times \mathbf{A})$  mukaisesti. Liitteessä M.1 on osoitettu, että  $\mathbf{B}^2 = (\nabla \times \mathbf{A})^2 = \nabla^2 \mathbf{A}^2$ .

Tämän tuloksen avulla yhtälön (87) integrandi  $\mathcal{I}$  voidaan kirjoittaa muodossa

$$\begin{aligned} \mathcal{I} &= \frac{1}{2m} (-i\hbar\nabla + e\mathbf{A})\phi^* (i\hbar\nabla + e\mathbf{A})\phi + \frac{\mathbf{B}^2(\mathbf{r})}{2\mu_0} \\ &= \frac{1}{2m} (-\hbar^2 \nabla \phi^* \nabla \phi - i\hbar \nabla \phi^* e \mathbf{A} \phi + i\hbar e \mathbf{A} \phi^* \nabla \phi + e^2 \mathbf{A}^2 \phi^* \phi) + \frac{\nabla^2 \mathbf{A}^2}{2\mu_0}, \end{aligned} \quad (90)$$

jossa kaikki  $\mathbf{A}$ :sta riippumattomat termit on jätetty pois, sillä ne ovat merkityksettömiä  $\mathbf{A}$ :n varioinnin suhteen. Varioimalla nyt yhtälö (90) vektoripotentiaalin  $\mathbf{A}$  suhteen saadaan

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{I}}{\partial \mathbf{A}} &= \frac{1}{2m} (-i\hbar e (\nabla \phi^*) \phi + i\hbar e \phi^* \nabla \phi + 2e^2 \mathbf{A} \phi^* \phi) + \frac{\nabla^2 \mathbf{A}}{\mu_0} \\ &= \frac{i\hbar e}{2m} (\phi^* \nabla \phi - \phi \nabla \phi^*) + \frac{e^2}{m} \mathbf{A} |\phi|^2 + \frac{1}{\mu_0} \nabla^2 \mathbf{A}. \end{aligned} \quad (91)$$

Yhtälö (90) voidaan esittää myös virrantiheyden  $\mathbf{J}$  avulla hyödyntämällä liitteessä M.2 todistettua vektori-identiteettiä  $\nabla \times \nabla \times \mathbf{A} = \nabla(\nabla \cdot \mathbf{A}) - \nabla^2 \mathbf{A}$ . Londonin-Landaun mitassa (engl. London-Landau gauge)  $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$ , edellä mainittu identiteetti voidaan kirjoittaa muodossa  $\nabla \times \nabla \times \mathbf{A} = -\nabla^2 \mathbf{A}$ . Amperen lain ja vektoripotentiaalin määritelmän mukaan  $\nabla \times \mathbf{B} = \nabla \times (\nabla \times \mathbf{A}) = \mu_0 \mathbf{J}$ , joten  $\nabla^2 \mathbf{A} = -\mu_0 \mathbf{J}$ . Sijoittamalla tämä yhtälöön (91) ja asettamalla  $\partial \mathcal{I} / \partial \mathbf{A} = 0$  saadaan toinen GL-yhtälö sen tunnetuimmassa muodossa [1, 33]

$$\mu_0 \mathbf{J} = -\frac{i\hbar e}{2m} (\phi^* \nabla \phi - \phi \nabla \phi^*) - \frac{e^2}{m} \mathbf{A} |\phi|^2. \quad (92)$$

Yhtälöitä (89) ja (92) kutsutaan Ginzburg-Landau-yhtälöiksi ja ne esitetään tavallisesti yhtälöparina [4]

$$\begin{cases} \frac{1}{2m} (\hbar^2 \nabla^2 \phi - 2i\hbar e \mathbf{A} \cdot \nabla \phi - e^2 \mathbf{A}^2 \phi) - a\phi - b|\phi|^2 \phi = 0 \\ \mu_0 \mathbf{J} = -\frac{i\hbar e}{2m} (\phi^* \nabla \phi - \phi \nabla \phi^*) - \frac{e^2}{m} \mathbf{A} |\phi|^2. \end{cases} \quad (93)$$

### A.1 Vaiheparametrin yksikäsitteisyyslause

Yleiselle integraalille voidaan kirjoittaa

$$\int_a^b \nabla \theta(\mathbf{r}) d\mathbf{l} = \theta(b) - \theta(a). \quad (94)$$

Suljetulle viivaintegraalille yllä olevassa yhtälössä  $a = b$ . Järjestysparametrin  $\phi(\mathbf{r}) = |\phi(\mathbf{r})|e^{i\theta(\mathbf{r})}$  on luonnollisesti saatava yksikäsitteinen arvo missä tahansa avaruuden pisteessä. Funktion  $e^{i\theta}$  periodisuudesta seuraa, että em. ehto toteutuu vain kun

$$\theta(b) - \theta(a) = 2\pi n. \quad (95)$$

Sijoittamalla tämä yhtälöön (94) saadaan ns. vaiheparametrin yksikäsitteisyyslause

$$\oint \nabla \theta(\mathbf{r}) d\mathbf{l} = 2\pi n. \quad (96)$$

## A.2 Parametrien $a$ ja $b$ lämpötilariippuvuus

Ginzburg-Landau-teoriassa oletetaan, että suprajohtavan tilan vapaa energia  $G$  on riippuvainen systeemin normaalitilan vapaasta energiasta sekä termodynaamisesta suureesta  $\phi$ , jonka vaihtelu muuttaa kyseistä energiaa. Lähellä transitiolämpötilaa  $T_c$  systeemin vapaa energia tulisi voida esittää tämän termodynaamisen suureen sarjakehitelmänä muodossa

$$G \approx G_n(0, T) + \int_V a|\phi| + \frac{1}{2}b|\phi|^2 + \dots dV, \quad (97)$$

jossa integrointi suoritetaan suprajohtavan materiaalin yli sekä parametrit  $a$  ja  $b$  ovat termodynaamisesta suureesta  $\phi$  riippumattomia reaalilukuja, jotka voivat silti riippua vallitsevasta lämpötilasta. Kuten liitteessä A mainittiin, edustaa  $\phi$ :n itseisarvon neliö varsin intuitiivisesti suprajohteen supraelektronien tiheyttä  $n_s$ .

Yhtälöstä (97) voidaan tehdä useita johtopäätöksiä parametrien  $a$  ja  $b$  luonteesta. Transitiossa normaalin ja suprajohtavan faasin välillä vapaa energia  $G$  saa minimiarvonsa ja supraelektronien tiheyden on luonnollisesti oltava nolla. Näytteen ollessa suprajohtavassa tilassa parametri  $\phi$  on suuri ja yhtälöä (97) dominoi termi  $b|\phi|^2/2$ . Tästä seuraa, että  $b > 0$ , sillä muuten vapaa energia saavuttaisi minimiarvonsa suurilla supraelektronien tiheyksillä, missä ei selvästikään ole järkeä.

Parametrin  $a$  arvoista saadaan tietoa etsimällä vapaan energian minimi  $\phi$ :n funktiona, joka löytyy tunnetusti derivaatan nollakohdasta

$$\frac{\partial G}{\partial |\phi|} = 0 \iff a + b|\phi| = 0. \quad (98)$$

Yhtälöstä (98) nähdään, että parametri  $a$  määrää  $G$ :n derivaattafunktion nollakohdan, jossa faasitransitio tapahtuu. Lisäksi faasitransitiossa parametrien  $a$  ja  $b$  suhde on verrannollinen supraelektronien tiheyteen

$$|\phi| = -\frac{a}{b}. \quad (99)$$

Olkoon suprajohteen kriittinen lämpötila  $T_c$ , jonka alapuolella materiaali on suprajohtavassa tilassa ja  $|\phi| > 0$ . Lämpötilassa  $T_c$  tapahtuvassa faasitransitiossa ja tätä

korkeammissa lämpötiloissa  $|\phi| = 0$ . Yhtälöstä (100) seuraa, että  $a(T_c) = 0$ . Supraelektronien tiheyden on luonnollisesti oltava positiivinen suure, joten yhtälö (100) rajoittaa  $a$ :n arvot negatiivisiksi transitiolämpötilan alapuolella, eli  $a(T < T_c) < 0$ . Kyseiset ehdot toteuttaa ainakin yhtälö

$$a(T) = a_0 \left( \frac{T}{T_c} - 1 \right) \quad (100)$$

olettaen, että positiivinen parametri  $b$  ei riipu lämpötilasta, eli

$$b(T) = b_0. \quad (101)$$

Yhtälöiden (100) ja (101) avulla lasketut kriittisen kentän lämpötilariippuvuudet ym. tulokset vastaavat hyvin kokeellisesti määritettyjä arvoja [5, 34].

## B Tunkeutumissyvyys

Syvällä homogeenisen ja isotrooppisen suprajohteen sisällä suprajohtavien elektronien tiheyden oletetaan pysyvän vakiona eli järjestysparametrin  $\phi(\mathbf{r}) = |\phi(\mathbf{r})|e^{i\theta(\mathbf{r})}$  itseisarvo ja vaihe ovat vakioita. Tällöin liitteessä A johdetussa toisessa GL-yhtälössä (92) esiintyvä termi  $(\phi^*(\mathbf{r})\nabla\phi(\mathbf{r}) - \phi(\mathbf{r})\nabla\phi^*(\mathbf{r})) = 0$ . Tämän ja Amperen lain  $\mu_0\mathbf{J} = \nabla \times \mathbf{B} = \nabla \times \nabla \times \mathbf{A}$  avulla voidaan kyseinen yhtälö kirjoittaa muotoon

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{A} = -\frac{e^2}{m}\mathbf{A}|\phi|^2. \quad (102)$$

Hyödyntämällä uudestaan liitteessä A käytettyä vektori-identiteettiä  $\nabla \times \nabla \times \mathbf{A} = -\nabla^2\mathbf{A}$ , voidaan yhtälö (102) kirjoittaa yksiulotteisessa muodossa

$$\frac{d^2}{dx^2}A_y(x) = \frac{1}{\lambda_L^2}A_y(x), \quad (103)$$

mistä seuraa tunkeutumissyvyyden määritelmä

$$\lambda_L = \sqrt{\frac{m}{\mu_0 e^2 |\phi|^2}}. \quad (104)$$

Yhtälö (103) on toisen asteen homogeeninen differentiaaliyhtälö, jonka ratkaisuksi on helppo löytää

$$A_y(x) = A_0 e^{-x/\lambda_L}. \quad (105)$$

## C Koherenssipituus

Tarkastellaan GL-yhtälöiden käyttäytymistä nollakentässä epähomogeenisilla reunaehdoilla, jossa positiivisia koordinaatin  $x$  arvoja vastaavat avaruuden pisteet ovat suprajohteen sisällä ja negatiivisia arvoja vastaavat pisteet tyhjiössä.. Sijoittamalla  $\mathbf{A} = 0$  ensimmäiseen GL-yhtälöön saadaan

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \phi + a\phi + b|\phi|^2 \phi = 0. \quad (106)$$

Tekemällä sama virrantiheyden GL-yhtälölle saadaan puolestaan

$$\phi^* \nabla \phi = \phi \nabla \phi^*, \quad (107)$$

jonka mukaan järjestysparametrin vaihe on riippumaton paikasta. Vaiheparametrin voidaan täten olettaa saavan vain reaalisia arvoja, mikä helpottaa edellä esitetyn yhtälön (106) ratkaisua. Kyseinen yhtälö voidaan kirjoittaa yksiulotteisessa muodossa

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \phi}{dx^2} + a\phi + b|\phi|^2 \phi = 0. \quad (108)$$

Saatua yhtälöä voidaan yksinkertaistaa muuttujanvaihdoilla

$$\phi = \sqrt{\frac{|a|}{b}} f, \quad (109)$$

jonka avulla yhtälö (108) voidaan kirjoittaa muodossa

$$-\frac{\hbar^2}{2m|a|} \frac{d^2 f}{dx^2} + f(1 - f^2) = 0. \quad (110)$$

Määritellään vielä yksikötön muuttuja

$$\eta = \frac{x}{\xi} = \frac{x}{\sqrt{\frac{\hbar^2}{2m|a|}}}, \quad (111)$$

jossa on siis määritelty ns. koherenssipituus

$$\xi \equiv \frac{1}{\sqrt{\frac{\hbar^2}{2m|a|}}} . \quad (112)$$

Koherenssipituuden fysikaalinen merkitys tulee ilmi ratkaistaessa yhtälö (110) em. yksiköttömän muuttujan suhteen. Differentioimalla yhtälö (111) puolittain ja korottamalla tämän jälkeen molemmat puolet toiseen potenssiin saadaan

$$d\eta^2 = \frac{2m|a|}{\hbar^2} dx^2 \iff \frac{d}{dx^2} = \frac{2m|a|}{\hbar^2} \frac{d}{d\eta^2} . \quad (113)$$

Sijoittamalla differentiaalioperaattori (113) yhtälöön (110) saadaan yksinkertainen dimensioton differentiaaliyhtälö

$$\frac{d^2 f}{d\eta^2} + f(1 - f^2) = 0, \quad (114)$$

jonka ratkaisuksi on helppo löytää

$$f = \tanh \frac{\eta}{\sqrt{2}} . \quad (115)$$

Ratkaisu voidaan kirjoittaa parametrien  $f$  ja  $\eta$  määritelmiä (109) sekä (111) hyödyntäen myös järjestysparametrin avulla muodossa

$$\phi(x) = \sqrt{\frac{|a|}{b}} \tanh \left( \frac{x}{\xi\sqrt{2}} \right) . \quad (116)$$

Ratkaisusta (116) voidaan päätellä, että

$$\begin{cases} \phi \rightarrow \sqrt{|a|/b} \equiv \phi_\infty, & \text{kun } x \rightarrow \infty \\ \phi \rightarrow 0, & \text{kun } x \rightarrow 0. \end{cases} \quad (117)$$

Tämän lisäksi ratkaisusta nähdään myös, että koherenssipituus  $\xi$  skaalaa  $\phi(x)$ :n  $x$ -akselilla, jolloin se voidaan tulkita karakteristiseksi etäisyydeksi, jonka yli järjestysparametrin arvot suprajohteen sisällä vaihtelevat merkittävästi [1].

## D Londonin yhtälö magneettikentälle

Tarkastellaan kappaleessa A johdetun toisen GL-yhtälön (92) käyttäytymistä syvällä suprajohteen sisällä, jossa voimme olettaa järjestysparametrin, eli siis suprajohtavien elektronien tiheyden, pysyvän vakiona paikan funktiona. Matemaattisesti edellä mainittu oletus voidaan ilmaista muodossa  $\nabla|\phi(\mathbf{r})| = 0$ . Kirjoittamalla järjestysparametri yleisessä muodossa  $\phi(\mathbf{r}) = |\phi(\mathbf{r})|e^{i\theta(\mathbf{r})}$ , voidaan yhtälössä (92) esiintyvät järjestysparametrin gradientit kirjoittaa muodossa

$$\left\{ \begin{array}{ll} \nabla\phi(\mathbf{r}) = \nabla(|\phi(\mathbf{r})|e^{i\theta(\mathbf{r})}) &= \nabla(|\phi(\mathbf{r})|)e^{i\theta(\mathbf{r})} + |\phi(\mathbf{r})|ie^{i\theta(\mathbf{r})}\nabla(\theta(\mathbf{r})) \\ &= i\phi(\mathbf{r})\nabla\theta(\mathbf{r}) \\ \nabla\phi^*(\mathbf{r}) = \nabla(|\phi(\mathbf{r})|e^{-i\theta(\mathbf{r})}) &= \nabla(|\phi(\mathbf{r})|)e^{-i\theta(\mathbf{r})} - |\phi(\mathbf{r})|ie^{-i\theta(\mathbf{r})}\nabla(\theta(\mathbf{r})) \\ &= -i\phi^*(\mathbf{r})\nabla\theta(\mathbf{r}). \end{array} \right. \quad (118)$$

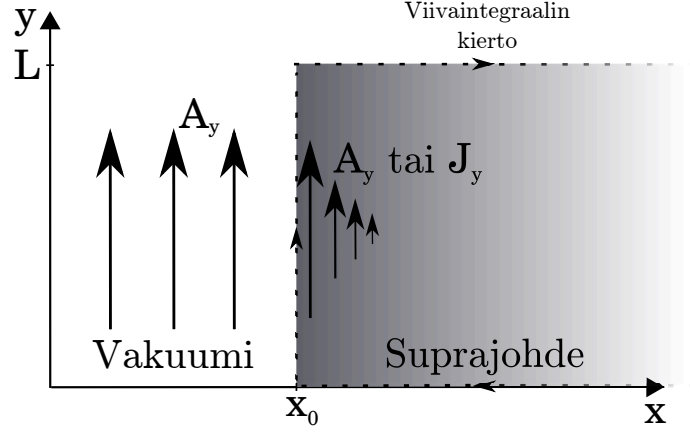
Sijoittamalla yhtälöt (118) GL-yhtälöön (92) saadaan

$$\begin{aligned} \mu_0\mathbf{J} &= -\frac{i\hbar e}{2m} [\phi^*(\mathbf{r})(i\phi(\mathbf{r})\nabla\theta(\mathbf{r})) - \phi(\mathbf{r})(-i\phi^*(\mathbf{r})\nabla\theta(\mathbf{r}))] - \frac{e^2}{m}\mathbf{A}|\phi|^2 \\ &= -\frac{i\hbar e}{2m} [i|\phi|^2\nabla\theta(\mathbf{r}) + i|\phi|^2\nabla\theta(\mathbf{r})] - \frac{e^2}{m}\mathbf{A}|\phi|^2 \\ &= -\frac{i\hbar e}{2m} [2i|\phi|^2\nabla\theta(\mathbf{r})] - \frac{e^2}{m}\mathbf{A}|\phi|^2 \\ &\iff \frac{m\mu_0\mathbf{J}}{e^2|\phi|^2} = \frac{\hbar}{e}\nabla\theta(\mathbf{r}) - \mathbf{A} \\ &\iff \frac{m}{e^2}\frac{\mu_0}{|\phi|^2} \oint \mathbf{J}d\mathbf{l} = \frac{\hbar}{e} \oint \nabla\theta(\mathbf{r})d\mathbf{l} - \oint \mathbf{A}d\mathbf{l}. \end{aligned} \quad (119)$$

Yhtälö (119) voidaan kirjoittaa liitteessä A.1 todistetun vaiheparametrin yksikäsitteisyyslauseen avulla muotoon

$$\frac{m}{e^2}\frac{\mu_0}{|\phi|^2} \oint \mathbf{J}d\mathbf{l} + \oint \mathbf{A}d\mathbf{l} = n\Phi_0, \quad (120)$$

missä  $\Phi_0 = 2\pi\hbar/e = h/e$  on magneettivuon kvantti ja  $n \in \mathbb{Z}$ . Yhtälön (120) oikean puolen dimensiona on magneettivuo [Wb], ja kyseisen yhtälön mukaan magneettivuo voi siis saada vain arvoja, jotka ovat magneettivuon kvantin  $\Phi_0$  monikertoja. Magneettivuo on siis kvantittunut suure.



Kuva 21. Ulkoisen kentän tunkeutuminen suprajohteeseen ja laskuissa käytetyn suljetun viivaintegraalin havainnollistus.

Liitteessä B osoitettiin, että ulkoinen magneettikenttä ja vektoripotentiaali pienenevät eksponentiaalisesti suprajohteen sisälle mentäessä. Amperen lain mukaan myös virrantiheyden on pienennytävä eksponentiaalisesti suprajohteen sisällä ja kuvan 21 merkinnöillä voidaan kirjoittaa, että  $A_y \rightarrow 0$  ja  $J_y \rightarrow 0$ , kun  $x \rightarrow \infty$ . Kuvasta 21 on helppo nähdä, että yhtälön (120) viivaintegraalit redusoituvat muotoon

$$L \left[ \frac{mJ_y}{e^2|\phi|^2} + A_y(x_0) \right] = n\Phi_0. \quad (121)$$

Yhtälössä (121) esiintyvät parametrit  $L$  ja  $x_0$  ovat täysin vapaavalintaisia. Koska parametri  $n$  voi saada ainoastaan kokonaisluku arvoja, toteutuu kyseinen yhtälö vain, jos  $n = 0$ . Tästä puolestaan seuraa, että yhtälössä (121) esiintyvä sulkulauseke on oltava nolla ja saadaan

$$\begin{aligned} \frac{mJ_y}{e^2|\phi|^2} + A_y(x_0) &= 0 \\ \iff A_y(x) &= -\mu_0\lambda_L^2 J_y(x), \end{aligned} \quad (122)$$

missä  $\lambda_L^2 = m/\mu_0 e|\phi|^2$  [1]. Faradayn laki voidaan kirjoittaa vektoripotentiaalin avulla muodossa  $\nabla \times \mathbf{E} + \partial_t(\nabla \times \mathbf{A}) = 0$ . Yhtälö (122) pätee myös yleisessä vektori-muodossa ja sijoittamalla se vektoripotentiaalin määritelmään  $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$ , saadaan



kirjoitettua magneettikentän ja virrantiheyden välille yhtälö

$$\mathbf{B} = -\mu_0 \lambda_L^2 \nabla \times \mathbf{J} \iff \nabla \times \mathbf{J} = -\frac{1}{\mu_0 \lambda_L^2} \mathbf{B}. \quad (123)$$

Amperen lain mukaan  $\mathbf{J} = \nabla \times \mathbf{B} / \mu_0 \iff \nabla \times \mathbf{J} = \nabla \times (\nabla \times \mathbf{B} / \mu_0)$ . Sijoittamalla yhtälö (123) Amperen lakiin, voidaan kirjoittaa

$$\nabla \times (\nabla \times \mathbf{B} / \mu_0) = -\frac{1}{\mu_0 \lambda_L^2} \mathbf{B} \iff \mathbf{B} = -\lambda_L^2 \nabla \times (\nabla \times \mathbf{B}). \quad (124)$$

Kappaleessa A käytettyä tulosta  $\nabla \times \nabla \times \mathbf{A} = -\nabla^2 \mathbf{A}$  hyödyntäen, voidaan yhtälö (124) kirjoittaa muodossa

$$\mathbf{B} = \lambda_L^2 \nabla^2 \mathbf{B}, \quad (125)$$

joka on ns. Londonin tai Helmholtzin yhtälö.

## E Vorteksit

Liitteessä D johdettiin magneettikentän tunkeutumista suprajohteen sisälle kuvaava Helmholtzin yhtälö (125). Olettamalla, että magneettikenttä tunkeutuu suprajohteen sisälle sylinterisymmetrisesti, jolloin  $\partial_\theta B_\theta = 0$  ja  $\partial_z B_z = 0$ , voidaan yhtälössä (125) esiintyvä Laplaceen operaattori kirjoittaa sylinterikoordinaatistossa muodossa [35]

$$\nabla^2 = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial}{\partial r} \right). \quad (126)$$

Helmholtzin yhtälö voidaan tämän avulla kirjoittaa muodossa

$$\frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left( r \frac{d}{dr} \right) B(r) = \frac{1}{\lambda_L^2} B(r) \iff \frac{\partial^2 B(r)}{\partial r^2} + r \frac{\partial B(r)}{\partial r} + \frac{r^2}{\lambda_L^2} B(r) = 0. \quad (127)$$

Yhtälön (127) ratkaisu on esitetty liitteessä M.3. Tuloksena saadaan funktio

$$B(r) = C_0 K_0 \left( \frac{r}{\lambda_L} \right), \quad (128)$$

jossa  $K_0(r/\lambda_L)$  on ensimmäisen asteen modifioitu Besselin funktio. Funktio  $K_0(r/\lambda_L)$  divergoi arvolla  $x = 0$ , mikä on selvästi epäfysikaalista. Ratkaisu ongelmaan on, että vorteksin ydin koostuu  $\xi$ -säteisestä alueesta, jossa ulkoinen magneettikenttä pysyy vakiona  $r$ :n funktiona. Ytimen ulkopuolella alueella  $\xi < r < \infty$  kenttä riippuu etäisyydestä funktion (128) mukaisesti. Voidaan siis kirjoittaa, että

$$B(r) = \begin{cases} C_0 K_0\left(\frac{\xi}{\lambda_L}\right) & r < \xi \\ C_0 K_0\left(\frac{r}{\lambda_L}\right) & r \geq \xi, \end{cases} \quad (129)$$

missä  $C_0 \in \mathbb{R}$ . Vakion  $C_0$  arvo voidaan ratkaista liitteessä D johdetusta magneettivuon kvantittumisehdosta (120). Kyseisessä yhtälössä esiintyvä vektoripotentiaalin viivaintegraali voidaan Stokesin lauseen avulla kirjoittaa muotoon  $\oint \mathbf{A} \cdot d\mathbf{l} = \oint (\nabla \times \mathbf{A}) d\mathbf{S} = \oint \mathbf{B} \cdot d\mathbf{S}$ . Sijoittamalla tämä sekä Helmholtzin yhtälön ratkaisu (132) yhtälöön (120) saadaan

$$\frac{m}{e^2} \frac{\mu_0}{|\phi|^2} \oint \mathbf{J} d\mathbf{l} + \oint_{\text{Ydin}} C_0 K_0\left(\frac{\xi}{\lambda_L}\right) d\mathbf{S} + \oint_{\text{Muu}} C_0 K_0\left(\frac{r}{\lambda_L}\right) d\mathbf{S} = n\Phi_0. \quad (130)$$

Suurilla etäisyyksillä vorteksin ytimen keskipisteestä  $\mathbf{J} \approx 0$  ja yhtälössä (130) esiintyvä virrantiheyden viivaintegraali voidaan jättää huomiotta. Valitsemalla integroitava reitti kauas vorteksin keskipisteestä, jossa  $r \gg 1$ , sekä merkitsemällä  $dS = 2\pi r dr$  saadaan [5]

$$\begin{aligned} & \int_0^\xi C_0 K_0\left(\frac{\xi}{\lambda_L}\right) 2\pi r dr + \int_\xi^\infty C_0 K_0\left(\frac{r}{\lambda_L}\right) 2\pi r dr = n\Phi_0 \\ \iff C_0 &= \frac{n\Phi_0}{2\pi \left[ \int_0^\xi K_0\left(\frac{\xi}{\lambda_L}\right) r dr + \int_\xi^\infty K_0\left(\frac{r}{\lambda_L}\right) r dr \right]} \\ \iff C_0 &\approx \frac{n\Phi_0}{2\pi \lambda_L^2}. \end{aligned} \quad (131)$$

Magneettikenttään varastoitunut energia  $U \sim \int B^2 dV$  pyrkii minimoimaan arvonsa. Kentän energia kasvaa siis verrannollisena yksittäiseen vorteksiin varastoituneen kentän neliöön. On siis energieettisesti edullisempaa pitää yksittäisen vorteksin kenttä mahdollisimman pienenä ja lisätä vorteksien kokonaistilavuutta kasvattamalla

vorteksien määrää. Täten voimme asettaa kaavassa (131) esiintyvän parametrin arvoksi  $n = 1$ . Yleiseksi yhtälöksi vorteksin muodolle saadaan siis

$$B(r) = \begin{cases} \frac{\Phi_0}{2\pi\lambda_L^2} K_0\left(\frac{\xi}{\lambda_L}\right) & r < \xi \\ \frac{\Phi_0}{2\pi\lambda_L^2} K_0\left(\frac{r}{\lambda_L}\right) & r \geq \xi. \end{cases} \quad (132)$$

### E.1 Vorteksit anisotropisessa materiaalissa

Liitteessä D johdettu Helmholtzin yhtälö symmetriselle ja isotrooppiselle materiaaalille (125) voidaan esittää komponenteittain muodossa

$$\mathbf{B} = \lambda_L^2 \nabla^2 \mathbf{B} \iff B = \lambda_L^2 \left( \frac{\partial^2 B}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 B}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 B}{\partial z^2} \right), \quad (133)$$

jossa on merkitty  $B = B(x, y, z)$ . Anisotrooppiselle materiaaalille tunkeutumissyvyyden  $\lambda_L$  arvot voivat poiketa toisistaan  $x$ -  $y$ - ja  $z$ -suunnissa. Tällöin Helmholtzin yhtälö on kirjoitettava muodossa

$$\mathbf{B} = \Lambda_L^2 \nabla^2 \mathbf{B} \iff B = \lambda_x \frac{\partial^2 B}{\partial x^2} + \lambda_y \frac{\partial^2 B}{\partial y^2} + \lambda_z \frac{\partial^2 B}{\partial z^2}, \quad (134)$$

jossa vakio  $\lambda_L$  on muutettu tensoriksi

$$\Lambda = \begin{bmatrix} \lambda_x & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_y & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_z \end{bmatrix}. \quad (135)$$

Yhtälöstä (134) voidaan periaatteessa ratkaista vorteksin kentän muoto kaikissa mahdollisissa anisotrooppisissa konfiguraatioissa. Useimmissa tapauksissa tämä on kuitenkin vaikea tehtävä, joten tässä tutkielmassa perehdytään yksinkertaisimpaan tapaukseen, jossa ulkoinen homogeeninen magneettikenttä tunkeutuu  $z$ -akselin suunnassa  $xy$ -anisotrooppiseen materiaaliin, jossa  $\lambda_x \neq \lambda_y$ . Edellä mainitut oletukset voidaan ilmaista matemaattisesti kirjoittamalla, että magneettikentän  $x$ - ja  $y$ -suuntaisille komponenteille  $B_x = B_y = 0$  ja  $\partial_z B = 0$ . Sijoittamalla nämä alkuehdot

yhtälöön (134) saadaan yksittäisen vorteksin kenttää kuvaavaksi yhtälöksi

$$B_z(x, y) = \lambda_x^2 \frac{\partial^2 B_z(x, y)}{\partial x^2} + \lambda_y^2 \frac{\partial^2 B_z(x, y)}{\partial y^2}. \quad (136)$$

Seuraavaksi skaalataan koordinaatisto isotrooppiseksi muuttujanvaihdolla

$$\begin{cases} x \longrightarrow x' = \sqrt{\frac{\lambda_x}{\lambda_y}} x \\ y \longrightarrow y' = \sqrt{\frac{\lambda_y}{\lambda_x}} y. \end{cases} \quad (137)$$

Derivaatat  $x$ :n ja  $y$ :n suhteen uudessa koordinaatistossa saadaan yksinkertaisesti differentioimalla yhtälöt (137), jolloin saadaan

$$\begin{cases} dx \longrightarrow dx' = \sqrt{\frac{\lambda_x}{\lambda_y}} dx \iff \frac{d}{dx} = \sqrt{\frac{\lambda_y}{\lambda_x}} \frac{d}{dx'} \iff \frac{d^2}{dx^2} = \frac{\lambda_y}{\lambda_x} \frac{d^2}{dx'^2} \\ dy \longrightarrow dy' = \sqrt{\frac{\lambda_y}{\lambda_x}} dy \iff \frac{d}{dy} = \sqrt{\frac{\lambda_x}{\lambda_y}} \frac{d}{dy'} \iff \frac{d^2}{dy^2} = \frac{\lambda_x}{\lambda_y} \frac{d^2}{dy'^2}. \end{cases} \quad (138)$$

Sijoittamalla muunnetut differentiaalioperaattorit (138) yhtälöön (136), saadaan

$$B_z(x', y') = \lambda_x \lambda_y \frac{\partial^2 B(x', y')}{\partial x'^2} + \lambda_x \lambda_y \frac{\partial^2 B(x', y')}{\partial y'^2} \iff \mathbf{B} = \lambda'^2 \nabla^2 \mathbf{B}, \quad (139)$$

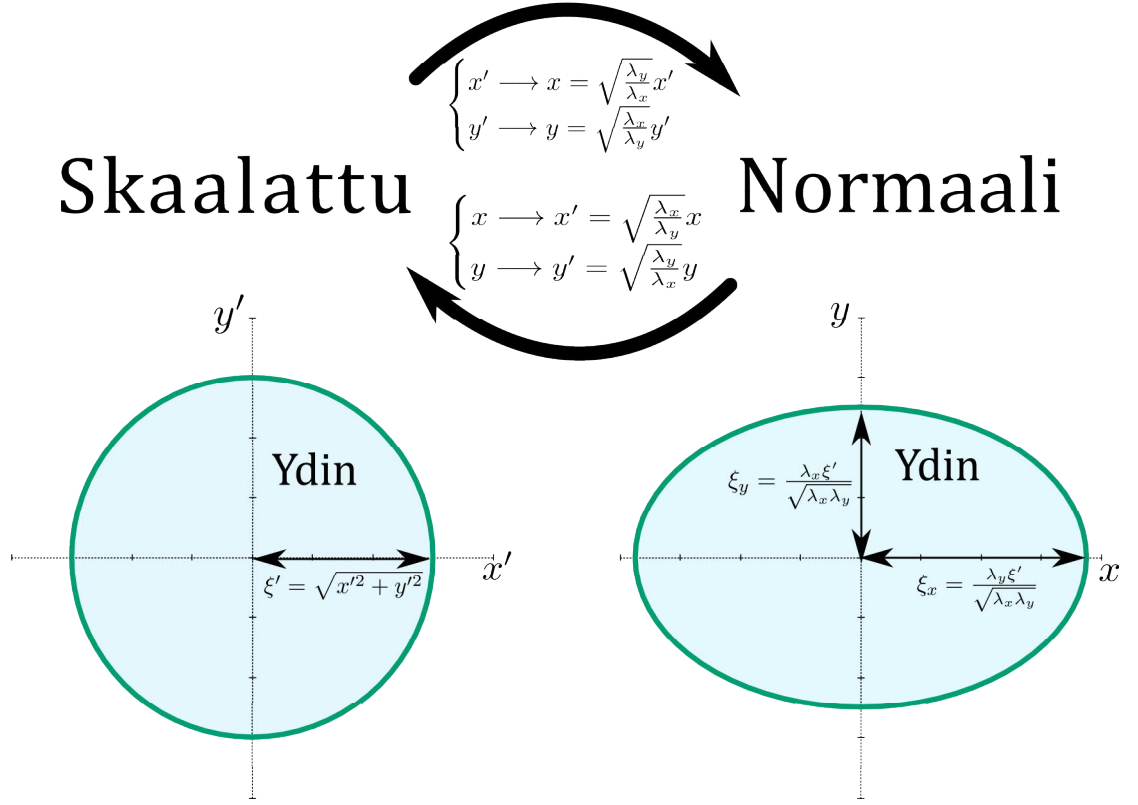
missä  $\lambda' = \sqrt{\lambda_x \lambda_y}$ . Yhtälö (139) on sama Helmholtzin yhtälö, joka johdettiin ja ratkaistiin liitteissä D ja E sekä liitteessä M.3. Olettamalla vorteksin kenttä sylinterisymmetriseksi  $z$ -akselin suhteen, voidaan Laplacen operaattori ilmaista pallokoordinaatistossa liitteessä E esitetyllä tavalla

$$\nabla^2 = \frac{1}{r'} \frac{\partial}{\partial r'} \left( r' \frac{\partial}{\partial r'} \right), \quad (140)$$

missä  $r' = \sqrt{x'^2 + y'^2}$ . Täysin luvussa E ja liitteessä M.3 esitetyn käsittelyn mukaisesti, voidaan yhtälön (139) ratkaisu esittää Besselin funktion avulla muodossa

$$B_z(x', y') = \frac{\Phi_0}{2\pi \lambda'^2} K_0 \left( \frac{r'}{\lambda'} \right) = \frac{\Phi_0}{2\pi \lambda_x \lambda_y} K_0 \left( \sqrt{\frac{x'^2 + y'^2}{\lambda_x \lambda_y}} \right). \quad (141)$$

Ilmaistaan yhtälö (141) alkuperäisessä anisotrooppisessa koordinaatistossa muuttamalla  $x' \longrightarrow x$  ja  $y' \longrightarrow y$  muunnoksen (137) osoittamalla tavalla. Sijoittamalla



Kuva 22. Vorteksin ytimen muoto skaalatussa ja normaalissa  $xy$ -koordinaatistossa.

muunnetut koordinaatit ratkaisuun (141), saadaan lopulta

$$B_z(x', y') \frac{\Phi_0}{2\pi\lambda_x\lambda_y} K_0 \left[ \sqrt{\left(\frac{x}{\lambda_y}\right)^2 + \left(\frac{y}{\lambda_x}\right)^2} \right]. \quad (142)$$

Ratkaisusta (142) nähdään varsin epäintuitiivinen tulos, jonka mukaan vorteksin kentän vaimeneminen  $x$ -suunnassa määräytyy  $y$ -suunnan tunkeutumissyvyydestä  $\lambda_y$  ja päinvastoin. Tämä on suora seuraus Amperen laista  $\nabla \times \mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{J}$ , jonka mukaan  $x$ -suuntaan liikkuva virta aiheuttaa magneettikentän  $y$ -suunnassa. Tunkeutumissyvyys on siis nimenomaan suprajohteen elektronien liikettä kuvaava parametri, kuten voidaan jo päätellä liitteessä D esitetystä määritelmästä  $\lambda_L = \sqrt{m/\mu_0 e^2 |\phi|^2}$ , missä  $m$  ja  $e$  ovat elektronin efektiivinen massa ja varaus. Kyseiset suureet todella riippuvat elektronin liikkeen suunnan kiderakenteesta [5].

Ratkaisun (142) mukaan vorteksin ydin ei selvästikään ole anisotrooppisessa tapauksessa liitteessä E esitetyn  $\xi$ -säteisen ympyrän muotoinen. Skaalatussa koordi-

naatistossa (137) voidaan kuitenkin analogisesti liitteessä E esitetyn käsittelyn mukaisesti esittää vorteksin muoto ympyränä, jonka säde on vakio

$$\xi' = \sqrt{x'^2 + y'^2}. \quad (143)$$

Yhtälö (143) voidaan jälleen muuttaa takaisin normaaliin koordinaatistoon muunnosta (137) hyödyntäen, jolloin saadaan yhtälö

$$\begin{aligned} \xi' &= \sqrt{\frac{\lambda_x}{\lambda_y}x^2 + \frac{\lambda_y}{\lambda_x}y^2} = \sqrt{\left(\frac{x}{\lambda_y/\sqrt{\lambda_x\lambda_y}}\right)^2 + \left(\frac{y}{\lambda_x/\sqrt{\lambda_x\lambda_y}}\right)^2} \\ &\iff \left(\frac{x}{\lambda_y\xi'^2/\sqrt{\lambda_x\lambda_y}}\right)^2 + \left(\frac{y}{\lambda_x\xi'^2/\sqrt{\lambda_x\lambda_y}}\right)^2 = 1. \end{aligned} \quad (144)$$

Saatu yhtälö on tunnettu ellipsin yhtälö. Vorteksin ytimen muoto on siis ellipsi, jonka isoakselin puolikas  $x$ - ja  $y$ -suunnassa on yhtälön (144) mukaisesti

$$\begin{cases} \xi_x = \frac{\lambda_y\xi'}{\sqrt{\lambda_x\lambda_y}} \\ \xi_y = \frac{\lambda_x\xi'}{\sqrt{\lambda_x\lambda_y}}. \end{cases} \quad (145)$$

Vorteksin ytimen muotoa skaalatussa ja normaalissa koordinaatistossa on havainnollistettu kuvassa 22.

## F Pyörteisyysvektori

Pyörteisyysvektori on määritelty yhtälön

$$\mathbf{V}(\mathbf{r}) = \mathbf{B} + \nabla \times (\Lambda \mathbf{J}_s) \quad (146)$$

mukaisesti. Pyörteisyysvektorin hyödyllisyys paljastuu integroimalla se vapaavalintaisen pinnan  $S$  yli, jolloin saadaan

$$\int_S \mathbf{V}(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{S} = \int_S \mathbf{B} \cdot d\mathbf{S} + \int_S [\nabla \times (\Lambda \mathbf{J}_s)] \cdot d\mathbf{S}. \quad (147)$$

Soveltamalla Stokesin lausetta  $\int_S (\nabla \times \mathbf{F}) \cdot d\mathbf{S} = \oint_C \mathbf{F} \cdot d\mathbf{l}$  yhtälön (147) viimeiseen integraaliin, voidaan pyörteisyysvektorin pintaintegraali kirjoittaa muodossa

$$\int_S \mathbf{V}(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{S} = \int_S \mathbf{B} \cdot d\mathbf{S} + \oint_C \Lambda \mathbf{J}_s \cdot d\mathbf{l}. \quad (148)$$

Liitteessä D johdettiin magneettivuon kvantittumisehto (120), joka voidaan vektoripotentialin määritelmän  $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$  ja Stokesin lauseen avulla kirjoittaa myös muodossa

$$\frac{m}{e^2} \frac{\mu_0}{|\phi|^2} \oint_C \mathbf{J} d\mathbf{l} + \oint_C \mathbf{A} d\mathbf{l} = n\Phi_0 \iff \frac{m}{e^2} \frac{\mu_0}{|\phi|^2} \oint_C \mathbf{J} d\mathbf{l} + \int_S \mathbf{B} \cdot d\mathbf{S} = n\Phi_0. \quad (149)$$

Vertaamalla yhtälöä (148) magneettivuon kvantittumisehtoon (149) voidaan todeta, että

$$\int_S \mathbf{V}(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{S} = n\Phi_0. \quad (150)$$

Yhtälön (150) täytyy päteä kaikille pinnoille  $S$ . Kyseinen pinta voidaan valita mielivaltaisen pieneksi, jolloin ainoa yhtälön (150) toteuttava funktio  $\mathbf{V}(\mathbf{r})$  on Diracin deltafunktio. Kyseinen funktion saa nolasta poikkeava arvonsa  $n\Phi_0$  ainoastaan tason pisteessä  $\mathbf{r}_p$ . Pyörteisyysvektori voidaan siis kirjoittaa erittäin hyödyllisessä muodossa

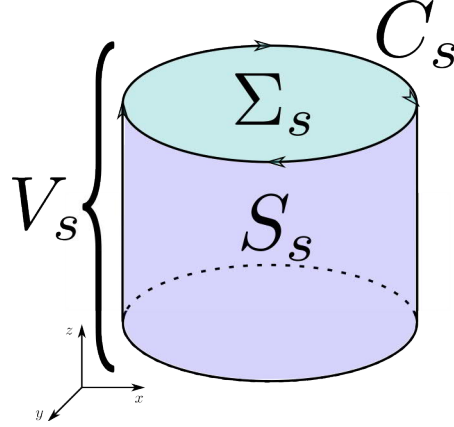
$$\mathbf{V}(\mathbf{r}) = n\Phi_0 \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_p) \mathbf{e}_V, \quad (151)$$

jossa  $\mathbf{e}_V$  on vorteksin ytimen kentän suuntainen yksikkövektori.

## G Vorteksien energia ja vuorovaikutus

Vorteksin energia muodostuu sekä magneettikenttään varastoituneesta energiasta sekä supraelektronien liike-energiasta. Kyseinen energia voidaan laskea tunnetusta kaavasta

$$W_s = \frac{1}{2\mu} \int_{V_s} [\mathbf{B}^2 + \mu \mathbf{J}_s \cdot \Lambda \mathbf{J}_s] dV, \quad (152)$$



Kuva 23. Integroitavien pintojen ja käyrien havainnollistusta.

jossa matriisi  $\Lambda$  ottaa huomioon suprajohteen mahdollisen anisotropian. Amperen lain  $\mu_0 \mathbf{J}_s = \nabla \times \mathbf{B}$  avulla yhtälö (152) voidaan kirjoittaa muotoon

$$W_s = \frac{1}{2\mu} \int_{V_s} [\mathbf{B}^2 + (\nabla \times \mathbf{B}) \cdot \Lambda \mathbf{J}_s] dV. \quad (153)$$

Hyödyntämällä vektori-identiteettiä  $(\nabla \times \mathbf{Y}) \cdot \mathbf{X} = \mathbf{Y} \cdot (\nabla \times \mathbf{X}) + \nabla \cdot (\mathbf{Y} \times \mathbf{X})$  yhtälön (153) integrandin toiseen termiin, saadaan

$$W_s = \frac{1}{2\mu} \int_{V_s} [\mathbf{B}^2 + \mathbf{B} \cdot (\nabla \times \Lambda \mathbf{J}_s) + \nabla \cdot (\mathbf{B} \times \Lambda \mathbf{J}_s)] dV. \quad (154)$$

Käyttäen Gaussin lausetta  $\int \nabla \cdot \mathbf{F} dV = \oint_S \mathbf{F} \cdot d\mathbf{S}$  yhtälön (154) integrandin viimeiseen termiin, voidaan kyseiselle alueelle varastoitunut energia kirjoittaa muodossa

$$W_s = \frac{1}{2\mu} \int_{V_s} [\mathbf{B}^2 + \mathbf{B} \cdot (\nabla \times \Lambda \mathbf{J}_s)] dV + \frac{1}{2\mu} \oint_{S_s} [\mathbf{B} \times (\Lambda \mathbf{J}_s)] \cdot d\mathbf{S}, \quad (155)$$

jossa pintaintegraali lasketaan siis tilavuutta  $V_s$  rajoittavan pinnan  $S_s$  yli kuvan 23 havainnollistamalla tavalla. Liitteessä F esitetyn pyörteisyysvektorin määritelmän avulla yhtälö (155) voidaan kirjoittaa yksinkertaisempaan muotoon

$$W_s = \frac{1}{2\mu_0} \int_{V_s} \mathbf{B} \cdot \mathbf{V} dV + \oint_{S_s} [\mathbf{B} \times (\Lambda \mathbf{J}_s)] \cdot d\mathbf{S}. \quad (156)$$

Energia pituusyksikköä kohden voidaan nyt laskea vähentämällä yhtälön (156) integraalien asteita, jolloin tilavuusintegraali muuttuu pintaintegraaliksi ja pintainte-



graali muuttuu viivaintegraaliksi. Tällöin energiaksi pituusyksikköä kohti saadaan

$$W'_s = \frac{1}{2\mu_0} \int_{\Sigma_s} \mathbf{B} \cdot \mathbf{V} dS + \oint_{C_s} [\mathbf{B} \times (\Lambda \mathbf{J}_s)] \cdot d\mathbf{l}. \quad (157)$$

Pinta ja käyrä, joiden yli yhtälössä (157) integroidaan, on havainnollistettu kuvassa 23. Integroitava reitti  $C_s$  voidaan valita äärettömän kauas vorteksin keskipisteestä, jolloin  $\mathbf{B}(\mathbf{r})$  ja  $\mathbf{J}(\mathbf{r})$  ovat mielivaltaisen pieniä. Yhtälössä (157) esiintyvä viivaintegraali siis katoaa ja energia pituusyksikköä kohti voidaan laskea kaavasta

$$W'_s = \frac{1}{2\mu_0} \int_{S_s} \mathbf{B} \cdot \mathbf{V} dS. \quad (158)$$

Tarkastellaan edellä johdetun yhtälön (157) avulla miten kaksi eri vorteksiä vuorovaikuttavat keskenään. Kyseisessä yhtälössä esiintyvät termit  $\mathbf{B}(\mathbf{r})$  ja  $\mathbf{V}(\mathbf{r})$  ovat nyt superpositio kahden erillisen vorteksin aiheuttamasta kentästä ja pyörteisyysvektorista. Kahden vorteksin kokonaiskenttä on liitteessä E johdettujen vorteksin kentän  $r$ -riippuvuuksien (132) superpositio ja pyörteisyysvektori voidaan esittää yhtälön (150) osoittamalla tavalla  $\delta$ -funktioiden avulla muodoissa

$$\begin{cases} \mathbf{B}(\mathbf{r}) = \frac{\Phi_0}{2\pi\lambda_L^2} \left[ K_0\left(\frac{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_1|}{\lambda_L}\right) + K_0\left(\frac{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_2|}{\lambda_L}\right) \right] \mathbf{e}_i \\ \mathbf{V}(\mathbf{r}) = [\Phi_0\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1) + \Phi_0\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_2)] \mathbf{e}_i. \end{cases} \quad (159)$$

Olkoon ensimmäinen vorteksi origossa ja toinen etäisyydellä  $r$  siitä, jolloin  $|\mathbf{r}_1| = 0$  ja  $|\mathbf{r}_2| = r$ . Vorteksien energia pituusyksikköä kohti voidaan nyt ratkaista sijoittamalla yhtälöt (159) yhtälöön (158). Liitteessä F johdetun pyörteisyysvektorin vaihtoehtoisen esitystavan (150) avulla on helppo todeta, että integrandi  $\mathbf{B}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{V}(\mathbf{r})$  katoaa kaikissa muissa tason  $S$  pisteissä, paitsi pisteissä  $\mathbf{r}_1$  ja  $\mathbf{r}_2$ , joka tekee yhtälön (158) integraalista helpon laskea. Besselin funktio  $K_0(r) \rightarrow \infty$ , kun  $r \rightarrow 0$ . Tämä matemaattinen ongelma voidaan välttää approksimoimalla ytimen kenttää liitteessä E esitetyllä tavalla  $K_0(0) \approx K_0(\xi/\lambda_L)$ . Tällä approksimaatiolla energiaksi pituusyksikköä kohti saadaan yksinkertaisesti

$$W'_s = \frac{\Phi_0^2}{2\pi\mu_0\lambda_L^2} K_0\left(\frac{\xi}{\lambda_L}\right) + \frac{\Phi_0^2}{2\pi\mu_0\lambda_L^2} K_0\left(\frac{r}{\lambda_L}\right). \quad (160)$$

Yhtälön (159) ensimmäinen termi on kahden yksittäisen vorteksin energioiden

$$E_V = \frac{\Phi_0^2}{4\pi\mu_0\lambda_L^2} K_0 \left( \frac{\xi}{\lambda_L} \right) \quad (161)$$

summa. Jälkimmäinen termi voidaan siten tulkita kahden vorteksin väliseksi vuorovaikutusenergiaksi

$$U = \frac{\Phi_0^2}{2\pi\mu_0\lambda_L^2} K_0 \left( \frac{r}{\lambda_L} \right). \quad (162)$$

## H Vorteksien välinen voima

Vorteksien välinen repulsiovoima pituusyksikköä kohti voidaan laskea liitteessä G johdetun vorteksien välisen vuorovaikutusenergian (162) avulla derivoimalla kyseisen yhtälö vorteksien ytimien välisen etäisyyden  $r$  suhteen, jolloin saadaan

$$\begin{aligned} f &= -\frac{\partial W'_s}{\partial r} = -\frac{\partial}{\partial r} \left[ \frac{\Phi_0^2}{2\pi\mu_0\lambda_L^2} K_0 \left( \frac{r}{\lambda_L} \right) \right] \\ &= -\Phi_0 \cdot \frac{1}{\mu_0} \left[ \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{\Phi_0}{2\pi\lambda_L^2} K_0 \left( \frac{r}{\lambda_L} \right) \right) \right]. \end{aligned} \quad (163)$$

Yhtälössä (163) esiintyvä derivaatta voidaan esittää vorteksin magneettikentän yhtälön (132) avulla muodossa

$$\frac{1}{\mu_0} \left[ \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{\Phi_0}{2\pi\lambda_L^2} K_0 \left( \frac{r}{\lambda_L} \right) \right) \right] = \frac{1}{\mu_0} \frac{\partial B(r)}{\partial r}, \quad (164)$$

joka on Amperen lain  $\nabla \times \mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{J}$  perusteella yksinkertaisesti vorteksin ydintä kiertävien supraelektronien virrantiheys  $J(r)$ . Yhtälö (163) voidaan siis kirjoittaa virrantiheyden avulla muodossa

$$f = -\Phi_0 J(r). \quad (165)$$

Vorteksin magneettikenttä  $\Phi_0$  on kotisuorassa supraelektronien liikkeeseen nähden, joten yhtälö (165) voidaan kirjoittaa yleisemmässä vektorimuodossa [5]

$$\mathbf{f} = -\Phi_0 \mathbf{e}_z \times \mathbf{J}(\mathbf{r}). \quad (166)$$

Vorteksien välinen repulsiovoima aiheutuu siis viime kädessä vorteksin kentän luovien supraelektronien vuorovaikutuksesta toisen vorteksin kentän kanssa.

# I Useamman vorteksin lukkiutuminen samaan lukkiutumiskeskukseen

Kaksi vorteksiä voi sopivissa olosuhteissa lukkiutua samaan lukkiutumiskeskukseen. Tämä muuttaa luvussa 1.6.4 esitettyä kriittisen virrantiheyden riippuvuutta lukkiutumiskeskusten dooppauskonsentraatiosta. Tässä kappaleessa tehty analyysi on analoginen Stephen Brunauerin, P. H. Emmettin ja Edward Tellerin kehittämään ns. BET-teoriaan kaasujen adsorboitumisesta pinnoille [36]. Merkitään yhden vorteksin lukkiutumiskeskusten miehityslukua  $\Theta_1$ :llä ja kahden vorteksin miehityslukua  $\Theta_2$ :lla. Lukkiutuneiden vorteksin kokonaismäärä voidaan kirjoittaa muodossa

$$n_p \sim \Theta_1 + 2\Theta_2 + 3\Theta_3 \dots = \sum_i i\Theta_i. \quad (167)$$

Lukkiutumiskeskukseen, jossa on valmiiksi  $i$  vorteksiä, lukkiutuvien vorteksin lukkiutumisenopeus on kappaleessa 1.6.4 tehdyn käsittelyn mukaisesti verrannollinen ulkoiseen kenttään  $B$ , virrantiheyteen  $J$ , vapaiden lukkiutumiskeskusten määrään sekä nopeusvakioon  $k_i^+ \sim e^{E_{p,i}/kT}$ . Voidaan siis kirjoittaa, että  $R_{p,i} \sim k_i^+ BJ\Theta_{i-1}$ . Vorteksin poistumisnopeus  $i$ :n vorteksin lukkiutumiskeskuksista on puolestaan verrannollinen poistumisvakioon  $k_i^- \sim e^{E_{f,i}/kT}$  sekä kyseisen määrän vortekseja lukinneiden lukkiutumiskeskuksen miehityslukuun  $\Theta_i$ . Voidaan siis kirjoittaa, että  $R_{f,i} \sim k_i^- \Theta_i$ . Tasapainotilassa  $R_{f,i} = R_{p,i}$ , eli

$$k_i^- \Theta_i = k_i^+ BJ\Theta_{i-1} \iff \Theta_i = \Lambda_i \Theta_{i-1}, \quad (168)$$

jossa on käytetty merkintää  $\Lambda_i = k_i^+ BJ/k_i^- \sim BJe^{(E_{p,i}-E_{f,i})/kT}$ . Olettaen, että yhteen lukkiutumiskeskukseen mahtuu kerralla korkeintaan kaksi vorteksiä, voidaan yhtälö (167) kirjoittaa yhtälön (168) avulla muodossa

$$n_p = n\Lambda_1 + 2n\Lambda_2\Theta_1 = n\Theta_0 (\Lambda_1 + 2\Lambda_1\Lambda_2). \quad (169)$$

Lukkiutumiskeskusten kokonaismäärä voidaan puolestaan esittää relaation

$$n \sim \sum_{i=1}^2 \Theta_i = \Lambda_1 \Theta_0 + \Lambda_2 \Theta_1 = \Theta_0 (\Lambda_1 + \Lambda_1 \Lambda_2) \quad (170)$$

avulla. Lukkiutuneiden vorteksien suhde lukkiutumiskeskusten kokonaismäärään  $n$  voidaan yhtälöiden (169) ja (170) avulla kirjoittaa muodossa

$$\Theta = \frac{n_p}{n} = \frac{\sum i \Theta_i}{\sum \Theta_i} = \frac{\Theta_0 (\Lambda_1 + 2\Lambda_1 \Lambda_2)}{\Theta_0 (\Lambda_1 + \Lambda_1 \Lambda_2)} = \frac{2\Lambda_2 + 1}{\Lambda_2 + 1}. \quad (171)$$

Kappaleessa 1.6.4 todettiin, että kriittinen virrantiheys on verrannollinen lukkiutumiskeskusten ja vorteksien osamäärään. Huomioimalla, että vorteksien lukumäärä on verrannollinen ulkoisen magneettikentän suuruuteen, voidaan kriittinen virrantiheys esittää muodossa

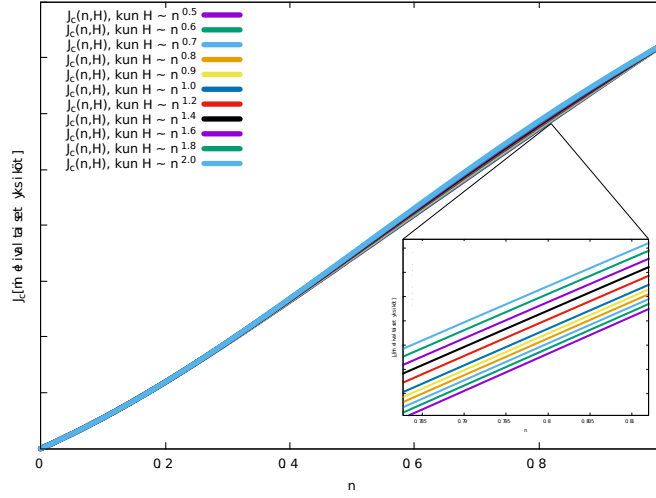
$$J_c \sim \frac{n_p}{n} \sim \frac{n\theta}{B} = \frac{n}{B} \left( \frac{2\Lambda_2 + 1}{\Lambda_2 + 1} \right), \quad (172)$$

jossa siis  $\Lambda_2 \sim B J e^{H/kT}$  ja  $H = E_{p,2} - E_{f,2}$  on vorteksin lukkiutumisenergian ja vapautumisenergian erotus toisen vorteksin varaamassa lukkiutumiskeskuksessa, täysin analogisesti kuvan 5 kanssa. Virta  $J$  edustaa tässä tapauksessa kriittistä virtaa  $J_c$ . Sijoittamalla  $\Lambda_2$ :n lauseke verrantoon (172) ja ratkaisemalla siitä  $J_c$ , saadaan

$$J_c \sim \frac{\sqrt{4n^2 e^{H/kT} + 1} + 2n e^{H/kT} - 1}{2B e^{H/kT}}. \quad (173)$$

Voidaan jälleen olettaa kappaleen 1.6.4 tapaan, että energia  $H$  on verrannollinen lukkiutumiskeskusten tiheyteen:  $H \sim n^x$ , missä  $x \in \mathbb{R}$ . Kuvassa 24 on esitetty yhtälön (173) ennustama kriittisen virrantiheyden riippuvuus lukkiutumiskeskusten konsentraatiosta eri  $H(x)$ :n arvoilla. Kriittinen virrantiheys kasvaa dooppauskonsentraation funktiona lähes lineaarisesti. Tämän lisäksi  $H$ :n riippuvuus dooppauskonsentraatiosta  $n$  ei vaikuta lähes lainkaan  $J_c(n)$ -käyrän muotoon.

Saatu tulos poikkeaa merkittävästi luvussa 1.6.4 johdetusta tuloksesta, jossa analysoitiin tilannetta, jossa yhteen lukkiutumiskeskukseen mahtuu ainoastaan yksi



Kuva 24. Kriittinen virrantiheys lukkiutumiskeskusten konsentraation funktiona eri parametrien  $H(n, x)$  arvoilla.

vorteksi. Kuvassa 6 esitetty  $J_c(n)$ -käyrä saavuttaa maksimiarvonsa tietyllä dooppauskonsentraatiolla, kun taas kuvassa 24 esitetty käyrä kasvaa likimain lineaarisesti dooppauskonsentraation funktiona. Yhden vorteksin tapauksessa  $H$ :n dooppauskonsentraatioriippuvuudella oli merkittävä vaikutus käyrän muotoon, kun taas tässä luvussa tarkastellussa kahden vorteksin tapauksessa  $H$ :n  $n$ -riippuvuudella ei ole suurta merkitystä. Mikäli yksittäiseen lukkiutumiskeskukseen mahtuu useampi kuin yksi vorteksi, pitäisi tämä joka tapauksessa havaita selvästi  $J(n)$ -käyrän muodosta.

## J Vorteksien termodynamiikkaa

Gibbsin energia ulkoisessa magneettikentässä olevalle suprajohteelle voidaan kirjoittaa muodossa

$$G(\mathbf{H}, T) = -TS(\mathbf{H}, T) + U(\mathbf{H}, T) - \int \mathbf{H} \cdot \mathbf{B} dV, \quad (174)$$

jossa  $V$  on suprajohteen tilavuus. Ilman ulkoista kenttää Gibbsin vapaa energia voidaan kirjoittaa yksinkertaisesti muodossa  $G(0, T) = -TS(0, T) + U(0, T)$ . Ulkoisessa kentässä suprajohteen sisäinen energia kasvaa  $W$ :n verran, jolloin siis  $U(\mathbf{H}, T) =$

$U(0, T) + W$ . Yhdistämällä nämä päätelmät, voidaan suprajohteen sisäinen energia ulkoisessa magneettikentässä kirjoittaa muodossa  $U(\mathbf{H}, T) = G(0, T) + TS(0, T) + W$ . Sijoittamalla tämä yhtälöön (174), voidaan Gibbsin energia ulkoisessa magneettikentässä ilmaista muodossa

$$\begin{aligned} G(\mathbf{H}, T) &= -TS(\mathbf{H}, T) + G(0, T) + TS(0, T) + W - \int \mathbf{H} \cdot \mathbf{B} dV \\ &= G(0, T) + W - \int \mathbf{H} \cdot \mathbf{B} dV - T[S(\mathbf{H}, T) - S(0, T)] . \end{aligned} \quad (175)$$

Suprajohtavan materiaalin  $\mathbf{H}$ -kentän muutoksella ei ole vaikutusta näytteen mikrotilojen määrään, eli  $S(\mathbf{H}, T) - S(0, T) = 0$ . Yhtälö (175) voidaan siis kirjoittaa ilman entropiatermiä. Lisäksi voidaan olettaa  $\mathbf{H}$ -kentän pysyvän vakiona näytteen sisällä, joten se voidaan kirjoittaa yhtälössä (175) esiintyvän integraalin ulkopuolelle. Saadaan siis, että

$$G(\mathbf{H}, T) = G(0, T) + W - \mathbf{H} \cdot \int \mathbf{B} dV . \quad (176)$$

Yhtälössä (176) esiintyvää termiä  $W - \mathbf{H} \cdot \int \mathbf{B} dV$  kutsutaan myös koenergiaksi (engl. coenergy) ja sitä merkitään usein  $W'$ :lla. Gibbsin energian muutos magneettikentän muuttuessa voidaan siis esittää koenergian avulla muodossa

$$\Delta G_{\mathbf{H}} = W - \mathbf{H} \cdot \int \mathbf{B} dV \equiv W' . \quad (177)$$

Yhtälö (177) osoittautuu todella hyödylliseksi, kun sen avulla lasketaan monia suprajohteita kuvaavia suureita seuraavissa luvuissa.

## J.1 Alempi kriittinen kenttä

Alempi kriittinen kenttä on määritelty kentäksi  $\mathbf{H}_{c1}$ , jota pienemmillä kentillä vortekseja ei muodostu suprajohteeseen. Tässä luvussa johdetaan yhtälö tyypin-II suprajohteen alemmalle kriittiselle kentälle käyttäen hyväksi liitteessä J johdettua Gibbsin energioiden erotusta eri  $\mathbf{H}$ -kenttien arvoilla, jonka mukaan siis

$$\Delta G_{\mathbf{H}} = W' , \quad (178)$$

missä ns. koenergia on määritelty  $W' \equiv W - \mathbf{H} \cdot \int \mathbf{B} dV$ . Faasitransitiossa lähellä  $\mathbf{H}_{c1}$ :stä Gibbsin energioiden erotus  $\Delta G_{\mathbf{H}} = 0$  ja ensimmäinen vorteksi pääsee tunkeutumaan suprajohteen läpi. Olkoon kyseisen vorteksin energia pituusyksikköä kohti  $E_V$ , jolloin

$$W = E_V z, \quad (179)$$

missä  $z$  on vorteksin pituus  $z$ -suunnassa. Liitteessä E todettiin lisäksi vorteksin kentän olevan sylinterisymmetrinen, joten  $W'$ :n yhtälössä esiintyvä integraali voidaan kirjoittaa kyseisen symmetrian omaavan koordinaatiston valinnalla muodossa

$$\mathbf{H} \cdot \int \mathbf{B} dV = \mathbf{H} \cdot \left( z \int_{x,y \in \mathbb{R}^2} \mathbf{B} \cdot d\mathbf{S} \right). \quad (180)$$

Liitteessä D johdetun vorteksin magneettivuon kvantittumisehdon mukaan voidaan kirjoittaa  $\int_{x,y \in \mathbb{R}^2} \mathbf{B} \cdot d\mathbf{S} = \Phi_0$ , jolloin yhtälö (180) voidaan kirjoittaa muotoon

$$\mathbf{H} \cdot \int \mathbf{B} dV = H z \Phi_0. \quad (181)$$

Sijoittamalla yhtälöiden (179) ja (181) antamat tulokset koenergian  $W'$ :n lausekkeeseen, voidaan Gibbsin energian muutos kirjoittaa muodossa

$$\Delta G_{\mathbf{H}} = z (E_V - H \Phi_0). \quad (182)$$

Faasitransitiossa kahden faasin välinen Gibbsin energian erotus  $\Delta G_{\mathbf{H}} = 0$ . Yhtälön (182) mukaan kyseinen ehto toteutuu vain, jos sulkeiden sisällä oleva termi saa arvon nolla. Toisin sanoen

$$H_{c1} = \frac{E_V}{\Phi_0}. \quad (183)$$

Sijoittamalla liitteessä G johdettu vorteksin kokonaisenergian yhtälö (161) yhtälöön (183) saadaan kriittisen kentän suuruudelle yhtälö [5]

$$H_{c1} = \frac{\Phi_0}{4\pi\mu_0\lambda_L^2} K_0 \left( \frac{\xi}{\lambda_L} \right). \quad (184)$$

## J.2 Ylempi kriittinen kenttä

Ylemmän kriittisen kentän yhtälö GL-parametrien funktiona voidaan johtaa suoraan liitteessä A johdetusta GL-yhtälöstä (89). Lähellä faasitransitiota supraelektronien tiheyttä kuvaava järjestysparametri  $\phi \approx 0$  ja yhtälössä (89) esiintyvä termi  $b|\phi|^2\phi$  voidaan jättää huomiotta. Tästä seuraa, että

$$\left( \frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} - \frac{2i\hbar e \mathbf{A}}{2m} \cdot \nabla - \frac{e^2 \mathbf{A}^2}{2m} \right) \phi = a\phi. \quad (185)$$

Lähellä faasitransitiota suprajohteen läpi kulkevat vorteksit ovat niin tiheässä, että ne alkavat mennä osittain päällekkäin toistensa kanssa. Tällöin suprajohteen läpi kulkeva magneettivuon tiheys vastaa suurinpiirtein ulkoista kenttää, eli  $\mathbf{B} \approx \mu_0 \mathbf{H}_{\text{app}}$ . Vektoripotentiaalin määritelmän mukaan  $\mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{H}_{\text{app}} = \nabla \times \mathbf{A}$ . Olettamalla ulkoisen kentän olevan  $z$ -akselin suuntaan ja merkitsemällä  $H_{\text{app}} = H_z$ , seuraa vektoripotentiaalin määritelmästä, että  $\mu_0 H_z = \partial_z A_y$ . Tästä saadaan integroimalla vallitsevan vektoripotentiaalin yhtälöksi  $A_y = \mu_0 H_z z$ . Sijoittamalla tämä yhtälöön (185) saadaan

$$\left( \frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} - \frac{i\hbar e \mu_0 H_z y}{m} \frac{\partial}{\partial x} - \frac{e^2 \mu_0^2 H_z^2 y^2}{2m} \right) \phi = a\phi. \quad (186)$$

Ratkaistaan yhtälö (186) käyttämällä yritettä

$$\phi \equiv \phi(x, y, z) = f(y) e^{i(k_x x + k_z z)} \quad (187)$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \nabla^2 \phi &= \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) f(y) e^{i(k_x x + k_z z)} \\ &= -k_x^2 f(y) e^{i(k_x x + k_z z)} + \frac{d^2 f(y)}{dy^2} e^{i(k_x x + k_z z)} + k_z^2 f(y) e^{i(k_x x + k_z z)} \\ &= -k_x^2 \phi + \left( \frac{d^2 f(y)}{dy^2} \right) \frac{\phi}{f(y)} - k_z^2 \phi \end{aligned} \quad (188)$$

$$\Rightarrow \frac{\partial}{\partial x} \phi = \frac{\partial}{\partial x} f(y) e^{i(k_x x + k_z z)} = i k_x e^{i(k_x x + k_z z)} = i k_x \phi. \quad (189)$$

Sijoittamalla yrite (187) ja sen derivaatat (188) ja (189) yhtälöön (186) saadaan

$$\begin{aligned} \frac{\hbar^2}{2m} \left( -k_x^2 \phi + \left( \frac{d^2 f(y)}{dy^2} \right) \frac{\phi}{f(y)} - k_z^2 \phi \right) - \frac{i\hbar e \mu_0 H_z y}{m} (i k_x \phi) \\ + \frac{e^2 \mu_0^2 H_z^2 y^2}{2m} \phi = a\phi. \end{aligned} \quad (190)$$



Yhtälöstä (190) voidaan jakaa pois molemmilla puolilla esiintyvä yrite  $\phi$ . Kun tämän jälkeen vielä kerrotaan yhtälö puolittain  $f(y) \equiv f$ :llä, saadaan helposti ratkaistavissa oleva differentiaaliyhtälö

$$\begin{aligned} & \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 f}{dy^2} - \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_z^2) f + \frac{\hbar e \mu_0 H_z k_x}{m} y f + \frac{e^2 \mu_0^2 H_z^2}{2m} y^2 f = a f \\ \Leftrightarrow & -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 f}{dy^2} + \frac{e^2 \mu_0^2 H_z^2}{2m} \left( y^2 + \frac{\hbar^2 k_x^2}{e^2 \mu_0^2 H_z^2} - \frac{2\hbar k_x}{e \mu_0 H_z} y \right) f = \left( a - \frac{\hbar k_z^2}{2m} \right) f. \end{aligned} \quad (191)$$

Merkitsemällä

$$\begin{cases} y_0 = \frac{\hbar k_x}{e \mu_0 H_z} \\ \omega = \frac{e \mu_0 H_z}{m} \\ E = a - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}, \end{cases} \quad (192)$$

voidaan yhtälö (191) kirjoittaa muodossa

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 f}{dy^2} + \frac{m\omega^2}{2} (y - y_0)^2 f = E f, \quad (193)$$

joka on kvanttimekaanisen harmonisen värähtelijän yhtälö. Yhtälön (193) ratkaisu on tunnetusti

$$E = \left( n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega, \quad (194)$$

jossa  $n \in \mathbb{N}$  [37]. Sijoittamalla käytetyt merkinnät (192) takaisin ratkaisuun (194), saadaan yhtälö

$$a - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} = \left( n + \frac{1}{2} \right) \frac{\hbar e \mu_0 H_z}{m} \Leftrightarrow H_z = \frac{a - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}}{\left( n + \frac{1}{2} \right) \hbar e \mu_0}. \quad (195)$$

Yhtälöstä (195) nähdään, että  $H$ -kenttä saavuttaa suurimman mahdollisen arvonsa kun  $n = 0$  ja  $k_z = 0$ . Korkein mahdollinen suprajohtavan materiaalin sisällä vallitseva  $H$ -kenttä on siis

$$H_z = \frac{2am}{\hbar e \mu_0}. \quad (196)$$

Lämpötilasta riippuva parametri  $a$  voidaan esittää liitteessä C esitetyn määritelmän (111) avulla muodossa  $a = \hbar^2/2m\xi^2$ . Sijoittamalla tämä yhtälöön (196) ja hyödyntämällä liitteessä D johdettua magneettivuon kvantin  $\Phi_0 = 2\pi\hbar/e$  määritelmää, saadaan ylemmän kriittisen kentän yhtälöksi lopulta

$$H_z = \frac{\Phi_0}{2\pi\mu_0\xi^2}. \quad (197)$$

## K Vorteksien viruminen

Faradayn laki nopeudella  $\mathbf{v}$  liikkuvalla vorteksihilalle, johon varastoitunut kokonaiskenttä on  $\mathbf{B}$ , voidaan kirjoittaa muodossa

$$\nabla \times (\mathbf{E}_0 - \mathbf{v} \times \mathbf{B}) = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}. \quad (198)$$

Kaavassa (198) esiintyvä sähkökenttä  $\mathbf{E}_0$  riippuu tarkastelukoordinaatistosta. Vorteksihilan lepokoordinaatistossa suprajohteen magneettinen rakenne pysyy muuttumattomana ajan suhteen, joten tämän koordinaatiston valinnalla  $\mathbf{E}_0$  ja yhtälö (198) voidaan kirjoittaa muodossa

$$\nabla \times (\mathbf{v} \times \mathbf{B}) = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}. \quad (199)$$

Yhtälö (199) on vorteksien jatkuvuusyhtälö, jonka mukaan tilavuuteen  $V$  saapuvien ja lähtevien vorteksien määrä on yhtä suuri kokonaismagneettikentän  $\mathbf{B}$  muutoksen kanssa kyseisessä tilavuudessa. Faradayn laki  $-\partial\mathbf{B}/\partial t = \nabla \times \mathbf{E}$  on voimassa myös liikkuvan vorteksihilan lepokoordinaatistossa, jolloin yhtälö (199) voidaan kirjoittaa muodossa

$$\nabla \times (\mathbf{v} \times \mathbf{B}) = \nabla \times \mathbf{E} \iff \mathbf{E} = \mathbf{B} \times \mathbf{v}, \quad (200)$$

jossa sähkökenttä  $\mathbf{E}$  on liikkuvien vorteksien indusoima kenttä. Vorteksien liike on luonnollisesti kohtisuorassa niiden magneettikenttää vastaan, joten yhtälö voidaan

esittää skalaarimuodossa  $E = Bv$ . Vorteksien keskimääräinen nopeus on verrannollinen vapaiden vorteksien määrään  $n_f \sim ae^{-H/kT}$ , jossa  $a \in \mathbb{R}$  ja  $H = E_p - E_f$  on luvussa 1.6.4 määritelty lukkiutumisenergian ja vapautumisenergian erotus. Yhtälö (200) voidaan siis kirjoittaa muotoon

$$E \sim Bae^{-H/kT}. \quad (201)$$

Kriittisessä tilassa vorteksin vapautumisenergia  $E_f \rightarrow 0$ , jolloin  $H \rightarrow E_p$ . Tätä pienemmillä  $E_f$ :n arvoilla vorteksit pääsevät liikkumaan täysin vapaasti. On selvää, että vapautumisenergian  $E_f$  arvo kasvaa virrantiheyden pienentyessä. Voidaan siis kirjoittaa, että

$$E_f = E_0 - sJ, \quad (202)$$

jossa  $s \in \mathbb{R}$ . Kriittisessä tilassa, jossa vapautumisenergia  $E_f = 0$ , saavutetaan korkein mahdollinen häviötön virta  $J_c$ . Näillä reunaehdoilla yhtälöstä (202) saadaan ratkaistua vakion  $s$  arvoksi  $s = E_0/J_0$  ja vapautumisenergia voidaan kirjoittaa kriittisen virrantiheyden avulla muodossa

$$E_f = E_0 \left( 1 - \frac{J}{J_c} \right). \quad (203)$$

Faradayn ja Amperen lakien avulla voidaan kirjoittaa verranto  $E \sim \partial_t B \sim \partial_t J$ . Tämän ja yhtälön (202) avulla voidaan verranto (201) kirjoittaa muodossa

$$\frac{\partial J}{\partial t} \sim ae^{E_0(1-J/J_c)/kT}. \quad (204)$$

Yhtälön (204) ratkaisu voidaan esittää muodossa

$$\frac{J}{J_0} = 1 - \frac{kT}{E_0} \ln \left( \frac{aE_0 t}{J_c kT} + 1 \right). \quad (205)$$

Tietyn ajanhetken jälkeen yhtälössä (205) esiintyvän logaritmin sisällä esiintyvä 1 muuttuu merkityksettömästi ja virrantiheys riippuu lineaarisesti ajan luonnollisesta logaritmista [14]

$$\frac{J}{J_0} \approx -\frac{kT}{E_0} \ln(t) + 1. \quad (206)$$

## L Kriittinen virrantiheys

Suprajohteelle, jossa ei ole vortekseja tai jossa ne ovat lukkiutuneet täydellisesti paikoilleen, voidaan kriittiselle virrantiheydelle johtaa yhtälö lähtemällä liikkeelle liitteessä A johdetuista GL-yhtälöistä (93). Homogeenisen ja isotrooppisen suprajohteen järjestysparametri on paikkariippuvainen ainoastaan vaihetermin  $\theta(\mathbf{r})$  kautta, eli voidaan kirjoittaa  $\phi(\mathbf{r}) = \phi_0 e^{i\theta(\mathbf{r})}$ . Yhtälöissä (93) esiintyvät järjestysparametrin ja sen kompleksikonjugaatin gradientit voidaan nyt laskea auki:

$$\begin{cases} \nabla \phi(\mathbf{r}) &= \nabla (\phi_0 e^{i\theta(\mathbf{r})}) = \phi_0 i e^{i\theta(\mathbf{r})} \nabla \theta(\mathbf{r}) = i \phi(\mathbf{r}) \nabla \theta(\mathbf{r}) \\ \nabla \phi^*(\mathbf{r}) &= \nabla (\phi_0 e^{-i\theta(\mathbf{r})}) = -\phi_0 i e^{-i\theta(\mathbf{r})} \nabla \theta(\mathbf{r}) = -i \phi^*(\mathbf{r}) \nabla \theta(\mathbf{r}). \end{cases} \quad (207)$$

Sijoittamalla yhtälöt (207) virrantiheyden GL-yhtälöön saadaan

$$\begin{aligned} \mu_0 \mathbf{J} &= -\frac{i\hbar e}{2m} [\phi^* i \phi(\mathbf{r}) \nabla \theta(\mathbf{r}) + \phi(\mathbf{r}) i \phi^*(\mathbf{r}) \nabla \theta(\mathbf{r})] - \frac{e^2}{m} \mathbf{A} |\phi|^2 \\ &= -\frac{i\hbar e}{2m} [2i |\phi(\mathbf{r})| \nabla \theta(\mathbf{r})] - \frac{e^2}{m} \mathbf{A} |\phi|^2 \\ &= \frac{\hbar e}{m} \phi_0^2 \left[ \nabla \theta(\mathbf{r}) - \frac{e}{\hbar} \mathbf{A} \right] \\ &= \frac{\hbar e}{m} \phi_0^2 \left[ \nabla \theta(\mathbf{r}) - \frac{2\pi}{\Phi_0} \mathbf{A} \right], \end{aligned} \quad (208)$$

jossa on käytetty hyväksi magneettivuon kvanttia  $\Phi_0 = h/e$ . Sijoittamalla järjestysparametri  $\phi(\mathbf{r}) = \phi_0 e^{i\theta(\mathbf{r})}$  toiseen GL-yhtälöön (89) saadaan

$$\begin{aligned} &\frac{1}{2m} [\hbar^2 \nabla^2 (\phi_0 e^{i\theta(\mathbf{r})}) - 2i\hbar e \mathbf{A} \cdot \nabla (\phi_0 e^{i\theta(\mathbf{r})}) - e^2 \mathbf{A}^2 \phi_0 e^{i\theta(\mathbf{r})}] \\ &\quad - a \phi_0 e^{i\theta(\mathbf{r})} - b \phi_0^3 e^{i\theta(\mathbf{r})} = 0 \\ \iff &\frac{1}{2m} [\hbar^2 \nabla (\phi_0 i e^{i\theta(\mathbf{r})} \nabla \theta) - 2i\hbar e \mathbf{A} \cdot (i \phi_0 e^{i\theta(\mathbf{r})} \nabla \theta) - e^2 \mathbf{A}^2 \phi_0 e^{i\theta(\mathbf{r})}] \\ &\quad - a \phi_0 e^{i\theta(\mathbf{r})} - b \phi_0^3 e^{i\theta(\mathbf{r})} = 0 \\ \iff &\frac{1}{2m} [\hbar^2 (\nabla (\phi_0 i e^{i\theta(\mathbf{r})}) \nabla \theta + \phi_0 i e^{i\theta(\mathbf{r})} \nabla^2 \theta) - 2i\hbar e \mathbf{A} \cdot (i \phi_0 e^{i\theta(\mathbf{r})} \nabla \theta) - e^2 \mathbf{A}^2 \phi_0 e^{i\theta(\mathbf{r})}] \\ &\quad - a \phi_0 e^{i\theta(\mathbf{r})} - b \phi_0^3 e^{i\theta(\mathbf{r})} = 0 \\ \iff &\frac{1}{2m} [\hbar^2 (-\phi_0 e^{i\theta(\mathbf{r})} (\nabla \theta)^2 + \phi_0 i e^{i\theta(\mathbf{r})} \nabla^2 \theta) - 2i\hbar e \mathbf{A} \cdot (i \phi_0 e^{i\theta(\mathbf{r})} \nabla \theta) - e^2 \mathbf{A}^2 \phi_0 e^{i\theta(\mathbf{r})}] \\ &\quad - a \phi_0 e^{i\theta(\mathbf{r})} - b \phi_0^3 e^{i\theta(\mathbf{r})} = 0. \end{aligned} \quad (209)$$

Homogeeniselle ja isotrooppiselle suprajohteelle  $\nabla^2\theta \ll 0$ , joten kyseinen termi yhtälössä (209) voidaan jättää huomiotta. Ottamalla lisäksi termi  $\phi_0 e^{i\theta(\mathbf{r})}$  yhteiseksi tekijäksi, voidaan yhtälö (209) kirjoittaa muodossa

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{2m} [-\hbar^2 (\nabla\theta)^2 + 2\hbar e \mathbf{A} \cdot \nabla\theta - e^2 \mathbf{A}^2] \phi_0 e^{i\theta(\mathbf{r})} - a\phi_0 e^{i\theta(\mathbf{r})} - b\phi_0^3 e^{i\theta(\mathbf{r})} = 0 \\
& \iff \frac{1}{2m} (\hbar\nabla\theta + e\mathbf{A})^2 \phi_0 e^{i\theta(\mathbf{r})} - a\phi_0 e^{i\theta(\mathbf{r})} + b\phi_0^3 e^{i\theta(\mathbf{r})} = 0 \\
& \iff \frac{1}{2m} (\hbar\nabla\theta + e\mathbf{A})^2 \phi_0 - a\phi_0 + b\phi_0^3 = 0 \\
& \iff \frac{\hbar^2}{2ma} \left( \nabla\theta + \frac{2\pi}{\Phi_0} \mathbf{A} \right)^2 + 1 - \frac{b\phi_0^2}{a} = 0 \\
& \iff \left( \nabla\theta + \frac{2\pi}{\Phi_0} \mathbf{A} \right)^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (b\phi_0^2 - a) .
\end{aligned} \tag{210}$$

Sijoittamalla yhtälö (210) virrantiheydelle laskettuun yhtälöön (208), saadaan

$$J = \frac{\Phi_0}{2\pi\mu_0\lambda_L^2\epsilon} f^2 (1 - f^2)^{1/2} , \tag{211}$$

missä  $\lambda_L^2 = m/\mu_0 e^2 \phi^2$  on tunkeutumisvyvyys,  $\epsilon = (\hbar^2/2ma)^{1/2}$  sekä  $f = \phi(b/a)^{1/2}$ . Suprajohteessa kulkeva suurin mahdollinen virrantiheys saavutetaan silloin, kun termi  $f^2(1 - f^2)^{1/2}$  saavuttaa maksimiarvonsa. Kyseinen arvo löytyy derivaatan nol-lakohdasta  $\partial_f f^2(1 - f^2)^{1/2} = 0 \iff f = \sqrt{6}/3$ , joten kriittiseksi virrantiheydeksi saadaan [1]

$$J_c = \frac{\Phi_0}{3\sqrt{3}\pi\mu_0\lambda_L^2\epsilon} . \tag{212}$$

## M Matemaattisia tuloksia

### M.1 Vektori-identiteetti nro. 1

Roottori voidaan esittää Levi-Civita-symbolin avulla muodossa

$$(\nabla \times \mathbf{A})_k^2 = (\epsilon_{ijk} \partial_i A_j)^2 = \epsilon_{ijk} \epsilon_{ijk} \partial_i \partial_i A_j A_j . \tag{213}$$

Yhtälössä (213) esiintyvä termi voidaan kirjoittaa Levi-Civita-identiteetin  $\epsilon_{ijk}\epsilon_{lmn} = \delta_{jm}\delta_{kn} - \delta_{jn}\delta_{km}$ , jossa  $\delta_{ij}$  on Kroneckerin delta, avulla muodossa

$$\epsilon_{ijk}\epsilon_{ijk} = \delta_{jj}\delta_{kk} - \delta_{jk}\delta_{kj} = 1 - 0 = 1. \quad (214)$$

Yhtälössä (213) esiintyvä termi  $\partial_i\partial_i A_j A_j$  on selvästi  $\nabla^2 \mathbf{A}^2$ , joten yhtälö (213) voidaan tämän ja yhtälön (214) avulla kirjoittaa muodossa

$$(\nabla \times \mathbf{A})^2_k = \nabla^2 \mathbf{A}^2 \quad (215)$$

## M.2 Vektori-identiteetti nro. 2

Levi-Civita symbolin avulla esitettynä roottorin roottori vektorista voidaan kirjoittaa muodossa

$$(\nabla \times \nabla \times \mathbf{A})_k = \epsilon_{ijk}\partial_i(\nabla \times \mathbf{A})_j = \epsilon_{ijk}\partial_i\epsilon_{abj}\partial_a A_b = \epsilon_{ijk}\epsilon_{abj}\partial_i\partial_a A_b. \quad (216)$$

Hyödynnetään seuraavaksi uudestaan liitteessä M.1 esitettyä Levi-Civita identiteettiä  $\epsilon_{ijk}\epsilon_{lmn} = \delta_{jm}\delta_{kn} - \delta_{jn}\delta_{km}$ , voidaan yhtälö (216) kirjoittaa Kroneckerin deltojen avulla muodossa

$$\begin{aligned} (\nabla \times \nabla \times \mathbf{A})_k &= (\delta_{ib}\delta_{ka} - \delta_{ia}\delta_{kb}) \partial_i\partial_a A_b \\ &= \delta_{ib}\delta_{ka}\partial_i\partial_a A_b - \delta_{ia}\delta_{kb}\partial_i\partial_a A_b \\ &= \partial_b\partial_k A_b - \partial_i\partial_i A_k. \end{aligned} \quad (217)$$

Yhtälössä (217) esiintyvät termit on helppo tunnistaa vektorioperaattoreiksi  $\partial_b\partial_k A_b = \nabla(\nabla \cdot \mathbf{A})$  ja  $\partial_i\partial_i A_b = \nabla^2 \mathbf{A}$ , joten lopulta voidaan kirjoittaa

$$(\nabla \times \nabla \times \mathbf{A})_k = (\nabla(\nabla \cdot \mathbf{A}) - \nabla^2 \mathbf{A})_k. \quad (218)$$

## M.3 Helmholtzin yhtälön ratkaisu

Helmholtzin yhtälö voidaan kirjoittaa muodossa

$$y'' + \frac{1}{x}y' + \frac{1}{\lambda^2}y = 0, \quad (219)$$

missä  $\lambda \in \mathbb{R}$ . Ratkaistaan yhtälö (219) nk. Frobeniuksen menetelmällä sijoittamalla  $y:n$  ja sen derivaattojen paikalle yrite  $y(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^{n+r}$ , missä  $a_n, r \in \mathbb{R}$ . Yritefunktion  $y(x)$  ensimmäinen ja toinen derivaatta ovat  $y'(x) = \sum_{n=0}^{\infty} (n+r)a_n x^{n+r-1}$  ja  $y''(x) = \sum_{n=0}^{\infty} (n+r)(n+r-1)a_n x^{n+r-2}$ . Sijoittamalla nämä yhtälöön (219) saadaan

$$\begin{aligned} & \sum_{n=0}^{\infty} (n+r)(n+r-1)a_n x^{n+r-2} + \frac{1}{x} \sum_{n=0}^{\infty} (n+r)a_n x^{n+r-1} + \frac{1}{\lambda^2} \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^{n+r} = 0 \\ \iff & \sum_{n=0}^{\infty} (n+r)(n+r-1)a_n x^{n+r-2} + \sum_{n=0}^{\infty} (n+r)a_n x^{n+r-2} + \frac{1}{\lambda^2} \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^{n+r} = 0. \end{aligned} \quad (220)$$

Asetetaan sarjoissa esiintyvien  $x$ :ien potenssit saman arvoisiksi kirjoittamalla termi  $\sum_{n=0}^{\infty} a_n x^{n+r}$  ekvivalentisti muodossa  $\sum_{n=2}^{\infty} a_{n-2} x^{n+r-2}$ . Kirjoitetaan myös kahden ensimmäisen sarjan kaksi ensimmäistä termiä ulos sarjasta, jolloin saadaan kaikki sarjat alkamaan indeksistä  $n = 2$ . Yhtälö (220) voidaan siis kirjoittaa muodossa

$$\begin{aligned} & r(r-1)a_0 x^{r-2} + r(r+1)a_1 x^{r-1} + \sum_{n=2}^{\infty} (n+r)(n+r-1)a_n x^{n+r-2} \\ & + r a_0 x^{r-2} + (r+1)a_1 x^{r-1} + \sum_{n=2}^{\infty} (n+r)a_n x^{n+r-2} + \frac{1}{\lambda^2} \sum_{n=2}^{\infty} a_{n-2} x^{n+r-2} = 0. \end{aligned} \quad (221)$$

Yhtälö (221) toteutuu vain, jos kaikkien  $x$ :n potenssien kertoimien summat ovat nolla. Potenssia  $x^{r-2}$  vastaavien kertoimien tapauksessa tämä johtaa yhtälöön

$$r(r-1)a_0 + r a_0 = 0 \xrightarrow{a_0 \neq 0} r = 0. \quad (222)$$

Termien  $x^{r-1}$  tapauksessa saadaan puolestaan

$$r(r+1)a_1 + (r+1)a_1 = 0 \xrightarrow{r=0} a_1 = 0. \quad (223)$$

Saatujen tulosten (222) ja (223) mukaisesti summien ulkopuoleiset termit ja parametrit  $r$  häviävät. Yhtälö (221) voidaan kirjoittaa muodossa

$$\begin{aligned}
& \sum_{n=2}^{\infty} n(n-1)a_n x^{n-2} + \sum_{n=2}^{\infty} n a_n x^{n-2} + \frac{1}{\lambda^2} \sum_{n=2}^{\infty} a_{n-2} x^{n-2} = 0 \\
& \iff \sum_{n=2}^{\infty} \left\{ \left[ n(n-1)a_n + n a_n + \frac{a_{n-2}}{\lambda^2} \right] x^{n-2} \right\} = 0 \\
& \iff n(n-1)a_n + n a_n + \frac{a_{n-2}}{\lambda^2} = 0 \\
& \iff a_n = \frac{a_{n-2}}{n^2 \lambda^2}.
\end{aligned} \tag{224}$$

Yhtälö (224) on rekursiokaava, josta voidaan laskea yrittien  $y(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^{n+r}$  kertoimet. Tuloksesta (223) seuraa, että kaikki parittomat kertoimet  $[a_0, a_1, a_3, \dots]$  ovat nollia. Tämä huomioiden voidaan yhtälö (224) kirjoittaa muodossa

$$a_{2n} = -\frac{a_{2n-2}}{4n^2 \lambda^2} = \frac{1}{4^n} \frac{a_0}{(n!)^2 \lambda^2}. \tag{225}$$

Sijoittamalla kertoimet (225) yritteeseen  $y(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^{n+r}$  ja huomioimalla, että myös yritteessä  $r = 0$ , saadaan Helmholtzin yhtälön ratkaisuksi

$$y(x) = K_0(x/\lambda) = \sum_{n=2}^{\infty} \frac{1}{4^n} \frac{a_0}{(n!)^2 \lambda^2} x^{2n}. \tag{226}$$

Ratkaisu (226) tunnetaan nollannen asteen modifioituna Besselin funktiona [38].